Material_id	Unit_cell_formula	*N*	*ρ*	*V*	*G*	*B*	Band_gap	*γ*	*κ_model*
mp-702	{'Ce': 1.0, 'Hg': 1.0}	2	10.08	56.14	1232	12	0.00	2.05	1058.08
mp-13181	{'La': 1.0, 'F': 3.0}	4	6.46	50.39	1000	63	4.92	2.22	402.48
mp-1008688	{'Ti': 2.0, 'Sn': 1.0}	3	5.18	68.69	623	60	0.00	2.16	347.25
mp-1639	{'B': 1.0, 'N': 1.0}	2	3.46	11.92	374	408	4.65	1.72	285.09
mp-862714	{'Be': 3.0, 'Ir': 1.0}	4	9.34	38.97	684	190	0.00	1.78	279.70
mp-2653	{'B': 2.0, 'N': 2.0}	4	3.45	23.88	383	373	5.36	1.72	185.18
mp-1018649	{'B': 1.0, 'C': 5.0}	6	3.26	36.08	347	378	0.00	1.57	146.75
mp-1569	{'Be': 2.0, 'C': 1.0}	3	2.46	20.26	231	201	1.44	1.73	127.69
mp-865168	{'Be': 3.0, 'Ni': 1.0}	4	4.21	33.79	308	138	0.00	1.76	125.35
mp-10148	{'In': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	7.12	55.20	299	45	0.00	2.31	119.66
mp-1009818	{'C': 1.0, 'N': 2.0}	3	3.64	18.26	288	404	0.16	1.95	116.50
mp-1330	{'Al': 1.0, 'N': 1.0}	2	4.04	16.84	217	255	4.55	1.86	113.98
mp-8062	{'Si': 1.0, 'C': 1.0}	2	3.17	21.00	187	211	1.59	1.85	112.42
mp-1145	{'Ti': 1.0, 'B': 2.0}	3	4.49	25.71	253	253	0.00	1.79	111.73
mp-1479	{'B': 1.0, 'P': 1.0}	2	2.95	23.50	162	161	1.47	1.80	101.99
mp-571653	{'C': 3.0, 'N': 4.0}	7	3.70	41.31	382	394	2.81	1.91	101.75
mp-11563	{'Ti': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	8.28	30.23	300	214	0.00	2.28	101.20
mp-1039293	{'Mg': 3.0, 'Cd': 1.0}	4	3.48	88.53	224	60	0.00	1.93	97.55
mp-568258	{'Fe': 2.0, 'Ge': 1.0}	3	7.76	39.43	326	107	0.00	2.15	93.75
mp-2252	{'Sc': 1.0, 'B': 2.0}	3	3.66	30.20	194	191	0.00	1.74	91.80
mp-972751	{'Si': 3.0, 'Ge': 1.0}	4	4.10	63.54	245	90	0.00	1.97	89.62
mp-1018050	{'Cr': 1.0, 'C': 1.0}	2	6.39	16.64	244	342	0.00	2.07	88.54
mp-1472	{'Zr': 1.0, 'B': 2.0}	3	6.03	31.06	226	238	0.00	1.78	87.94
mp-1491	{'V': 1.0, 'B': 2.0}	3	5.11	23.59	241	286	0.00	1.89	86.10
mp-27710	{'Cr': 1.0, 'B': 4.0}	5	4.25	37.18	258	277	0.00	1.76	83.06
mp-2305	{'Mo': 1.0, 'C': 1.0}	2	8.54	20.99	240	350	0.00	2.04	82.75
mp-1002105	{'V': 1.0, 'N': 1.0}	2	6.52	16.54	231	264	0.00	2.05	81.35
mp-1894	{'W': 1.0, 'C': 1.0}	2	15.35	21.19	279	385	0.00	2.00	81.14
mp-1282	{'V': 1.0, 'C': 1.0}	2	5.80	18.02	204	307	0.00	1.99	79.28
mp-1002206	{'Si': 1.0, 'C': 1.0}	2	4.01	16.61	176	241	0.00	1.93	78.49
mp-1010	{'Mn': 1.0, 'B': 4.0}	5	4.43	36.77	240	261	0.00	1.72	75.66
mp-631	{'Ti': 1.0, 'C': 1.0}	2	4.88	20.38	176	253	0.00	1.94	75.49
mp-11484	{'Zr': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	12.89	36.51	277	153	0.00	2.29	74.86
mp-1794	{'Be': 1.0, 'O': 1.0}	2	3.42	12.15	158	156	8.27	1.79	73.89
mp-1994	{'Hf': 1.0, 'B': 2.0}	3	11.12	29.88	242	251	0.00	1.76	72.14
mp-2634	{'Nb': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.98	22.24	211	313	0.00	2.04	72.14
mp-1008284	{'Cr': 3.0, 'Ni': 1.0}	4	7.73	46.10	200	218	0.00	1.52	71.47
mp-2857	{'Sc': 1.0, 'N': 1.0}	2	4.25	23.06	156	200	0.33	1.94	70.07
mp-784631	{'Cr': 1.0, 'Ni': 2.0}	3	8.62	32.63	112	228	0.00	0.82	69.93
mp-7140	{'Si': 2.0, 'C': 2.0}	4	3.17	42.01	185	212	2.30	1.85	69.79
mp-492	{'Ti': 1.0, 'N': 1.0}	2	5.34	19.24	180	259	0.00	1.99	69.60
mp-910	{'Nb': 1.0, 'C': 1.0}	2	7.62	22.88	197	300	0.00	2.02	69.10
mp-1459	{'Ta': 1.0, 'N': 1.0}	2	14.76	21.93	238	338	0.00	1.97	67.54
mp-1009471	{'Nb': 1.0, 'N': 1.0}	2	8.45	21.01	210	316	0.00	2.06	66.92
mp-1009735	{'Re': 1.0, 'C': 1.0}	2	16.15	20.38	234	411	0.00	1.91	65.90
mp-2852	{'C': 6.0, 'N': 8.0}	14	3.78	80.95	381	416	3.04	1.87	65.11
mp-2795	{'Zr': 1.0, 'C': 1.0}	2	6.50	26.36	159	221	0.00	1.88	64.92
mp-1009655	{'Ca': 1.0, 'C': 2.0}	3	3.81	27.93	161	192	0.00	1.78	64.42
mp-1514	{'U': 1.0, 'B': 2.0}	3	13.04	33.07	215	210	0.00	1.66	63.20
mp-1086	{'Ta': 1.0, 'C': 1.0}	2	14.23	22.51	215	324	0.00	1.93	62.24

mp-1008559	{'B': 2.0, 'P': 2.0}	4	2.95	46.99	158	170	1.08	1.79	62.23
mp-29663	{'Si': 6.0, 'Ir': 2.0}	8	7.47	122.99	334	145	0.00	2.03	62.16
mp-1002188	{'Tc': 1.0, 'B': 1.0}	2	8.54	21.16	179	294	0.00	1.90	61.74
mp-9973	{'V': 2.0, 'B': 2.0}	4	5.63	36.42	232	273	0.00	1.98	61.66
mp-975053	{'Rb': 3.0, 'Ba': 1.0}	4	1.95	335.15	115	5	0.00	2.07	61.66
mp-1542	{'Y': 1.0, 'B': 2.0}	3	5.05	36.38	151	164	0.00	1.69	60.35
mp-755264	{'Ti': 1.0, 'O': 1.0}	2	5.40	19.63	171	237	0.00	2.07	59.63
mp-1007923	{'Cr': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	8.62	43.94	105	222	0.00	0.71	58.90
mp-21075	{'Hf': 1.0, 'C': 1.0}	2	12.57	25.16	180	236	0.00	1.83	57.87
mp-1700	{'Al': 1.0, 'N': 1.0}	2	3.19	21.32	121	195	3.47	1.88	57.69
mp-374	{'Cr': 1.0, 'B': 2.0}	3	5.32	22.99	183	252	0.00	1.86	57.53
mp-450	{'Nb': 1.0, 'B': 2.0}	3	6.79	27.99	195	287	0.00	1.91	57.07
mp-642363	{'Al': 4.0, 'O': 6.0}	10	4.02	84.34	299	193	4.25	1.94	56.67
mp-1008630	{'W': 1.0, 'C': 1.0}	2	15.92	20.42	231	358	0.00	2.05	56.48
mp-585	{'Mn': 1.0, 'B': 2.0}	3	5.57	22.81	172	260	0.00	1.77	56.13
mp-644751	{'B': 4.0, 'N': 4.0}	8	3.04	54.28	215	303	5.67	1.72	55.87
mp-260	{'Cr': 2.0, 'B': 2.0}	4	6.23	33.50	223	266	0.00	1.94	55.82
mp-1009814	{'Sm': 1.0, 'As': 1.0}	2	7.87	47.55	146	71	0.00	1.95	55.51
mp-763	{'Mg': 1.0, 'B': 2.0}	3	2.64	28.92	118	148	0.00	1.69	53.93
mp-1007974	{'Cr': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	8.50	44.53	99	193	0.00	0.72	53.87
mp-2542	{'Be': 2.0, 'O': 2.0}	4	2.97	27.99	156	208	7.46	1.76	53.41
mp-1019317	{'Tc': 2.0, 'B': 4.0}	6	7.29	54.53	244	283	0.00	1.80	53.22
mp-925	{'V': 1.0, 'N': 1.0}	2	6.15	17.55	165	319	0.00	2.06	52.29
mp-16731	{'Y': 1.0, 'P': 1.0}	2	4.73	42.11	118	121	0.00	1.96	51.96
mp-1774	{'Er': 1.0, 'B': 2.0}	3	8.88	35.32	162	171	0.00	1.66	51.45
mp-8937	{'Cr': 1.0, 'Si': 2.0}	3	5.02	35.81	172	195	0.00	2.05	51.40
mp-1985	{'C': 6.0, 'N': 8.0}	14	3.50	87.32	312	409	3.34	1.89	51.28
mp-800	{'Tm': 1.0, 'B': 2.0}	3	9.11	34.74	166	174	0.00	1.70	50.31
mp-1008805	{'Re': 1.0, 'C': 2.0}	3	11.96	29.19	203	326	0.00	1.83	50.31
mp-2267	{'Ho': 1.0, 'B': 2.0}	3	8.64	35.84	156	170	0.00	1.66	49.73
mp-1108	{'Ta': 1.0, 'B': 2.0}	3	12.12	27.76	200	302	0.00	1.80	49.56
mp-1017532	{'V': 2.0, 'N': 2.0}	4	6.18	34.88	218	352	0.00	2.06	49.09
mp-1025170	{'Ti': 3.0, 'B': 4.0}	7	4.56	68.08	213	225	0.00	1.83	48.99
mp-1265	{'Mg': 1.0, 'O': 1.0}	2	3.47	19.28	119	151	4.64	1.93	48.89
mp-2057	{'Dy': 1.0, 'B': 2.0}	3	8.40	36.39	152	167	0.00	1.66	48.78
mp-1773	{'Re': 2.0, 'B': 4.0}	6	12.48	55.29	270	337	0.00	1.78	48.72
mp-2592	{'Si': 2.0, 'Mo': 1.0}	3	6.19	40.80	177	207	0.00	2.09	48.36
mp-1009831	{'Ta': 1.0, 'N': 1.0}	2	15.49	20.90	199	355	0.00	2.01	48.36
mp-1352	{'Zr': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.10	24.61	142	247	0.00	1.95	48.28
mp-1009134	{'Mn': 1.0, 'Fe': 1.0}	2	8.73	21.06	161	240	0.00	1.99	47.62
mp-997617	{'B': 1.0, 'Os': 1.0}	2	15.96	20.92	203	315	0.00	2.03	47.57
mp-10044	{'B': 1.0, 'As': 1.0}	2	5.09	27.98	124	128	1.25	1.95	47.53
mp-828	{'Si': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	7.88	43.05	103	215	0.00	0.94	47.16
mp-999549	{'W': 1.0, 'N': 2.0}	3	12.07	29.15	226	353	1.53	2.06	46.67
mp-1009695	{'Ca': 1.0, 'B': 2.0}	3	2.79	36.67	106	121	0.00	1.72	46.46
mp-2331	{'B': 4.0, 'Mo': 2.0}	6	7.04	55.49	225	295	0.00	1.85	45.90
mp-1418	{'Fe': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	8.70	44.26	96	203	0.00	0.82	45.87
mp-965	{'Tb': 1.0, 'B': 2.0}	3	8.11	36.97	145	163	0.00	1.67	45.87
mp-999120	{'Tc': 2.0, 'B': 2.0}	4	8.49	42.57	199	328	0.00	1.91	45.76
mp-2580	{'Nb': 2.0, 'B': 2.0}	4	7.43	46.36	197	264	0.00	1.98	45.44
mp-1346	{'B': 12.0, 'O': 2.0}	14	2.60	103.45	207	227	2.21	1.60	45.08

mp-2114	{'Y': 1.0, 'N': 1.0}	2	5.74	29.76	121	160	0.29	1.93	45.08
mp-11714	{'Si': 4.0, 'C': 4.0}	8	3.17	83.96	187	214	2.33	1.85	44.66
mp-569270	{'V': 3.0, 'B': 4.0}	7	5.43	59.99	232	278	0.00	1.94	44.18
mp-944	{'Al': 1.0, 'B': 2.0}	3	3.15	25.64	117	185	0.00	1.77	43.79
mp-1620	{'Si': 2.0, 'W': 1.0}	3	9.69	41.13	189	218	0.00	2.07	43.53
mp-2213	{'Fe': 1.0, 'Ni': 1.0}	2	8.45	22.50	92	187	0.00	1.30	42.87
mp-13150	{'B': 1.0, 'N': 1.0}	2	2.06	20.00	75	103	4.48	1.65	42.72
mp-11501	{'Mn': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	8.50	45.14	93	174	0.00	0.86	42.49
mp-1097	{'Ta': 2.0, 'B': 2.0}	4	13.98	45.55	213	266	0.00	1.84	42.44
mp-1007855	{'Fe': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	8.71	44.21	91	195	0.00	0.82	42.38
mp-1302	{'Pr': 1.0, 'O': 2.0}	3	6.12	46.91	162	120	0.00	2.12	42.30
mp-28395	{'B': 12.0, 'P': 2.0}	14	2.59	122.95	190	199	2.73	1.60	41.82
mp-2828	{'Hf': 1.0, 'N': 1.0}	2	13.68	23.36	156	266	0.00	1.89	41.76
mp-19091	{'Cr': 1.0, 'O': 1.0}	2	5.12	22.05	137	184	0.00	2.16	41.74
mp-1432	{'Be': 2.0, 'B': 1.0}	3	2.01	23.86	94	150	0.00	1.70	41.24
mp-22915	{'Ag': 1.0, 'I': 1.0}	2	6.80	57.29	185	19	0.47	2.69	40.78
mp-6947	{'Si': 2.0, 'O': 4.0}	6	4.13	48.27	203	272	5.50	2.05	40.44
mp-1009838	{'Zr': 1.0, 'N': 1.0}	2	6.92	25.24	126	240	0.00	1.98	39.95
mp-999198	{'B': 2.0, 'Mo': 2.0}	4	8.48	41.83	191	309	0.00	1.98	39.91
mp-2746	{'Mo': 1.0, 'C': 1.0}	2	8.51	21.05	144	335	0.00	2.04	39.58
mp-171	{'V': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	8.44	44.68	101	213	0.00	1.06	39.47
mp-960	{'B': 2.0, 'Mo': 1.0}	3	7.33	26.64	153	299	0.00	1.88	39.24
mp-8772	{'Sc': 1.0, 'B': 12.0}	13	2.85	101.78	188	218	0.00	1.62	39.13
mp-2853	{'Ga': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.14	19.47	140	209	0.51	2.05	39.06
mp-568619	{'Si': 5.0, 'C': 5.0}	10	3.17	105.00	187	213	1.87	1.85	38.48
mp-2701	{'Nb': 2.0, 'N': 2.0}	4	8.11	43.76	189	315	0.00	2.04	38.42
mp-1084	{'Zr': 1.0, 'B': 12.0}	13	3.61	101.67	201	233	0.00	1.62	38.30
mp-661	{'Al': 2.0, 'N': 2.0}	4	3.20	42.53	122	194	4.05	1.85	37.83
mp-7857	{'Ti': 4.0, 'B': 4.0}	8	4.58	85.17	190	207	0.00	1.86	37.65
mp-1008835	{'Os': 1.0, 'C': 2.0}	3	12.41	28.67	196	359	0.00	2.05	37.60
mp-219	{'Mo': 1.0, 'P': 1.0}	2	7.22	29.18	134	219	0.00	2.16	37.58
mp-425	{'Gd': 1.0, 'B': 2.0}	3	7.97	37.26	126	145	0.00	1.68	37.48
mp-889	{'Cr': 3.0, 'B': 4.0}	7	5.91	56.02	211	299	0.00	1.90	37.47
mp-2728	{'Mn': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	15.79	25.99	183	267	0.00	2.21	36.95
mp-27757	{'Be': 8.0, 'B': 2.0}	10	1.98	78.53	150	138	0.00	1.69	36.83
mp-24287	{'Cr': 1.0, 'H': 1.0}	2	6.52	13.49	137	238	0.00	2.01	36.53
mp-9208	{'V': 4.0, 'B': 6.0}	10	5.36	83.22	237	280	0.00	1.92	36.33
mp-696746	{'B': 12.0, 'C': 3.0}	15	2.47	111.29	178	227	1.64	1.58	36.02
mp-13178	{'Al': 2.0, 'N': 2.0}	4	3.42	39.78	123	205	3.27	1.86	35.80
mp-580	{'Pu': 1.0, 'B': 2.0}	3	12.80	34.46	144	139	0.00	1.67	35.36
mp-1580	{'Nb': 1.0, 'N': 1.0}	2	8.05	22.07	130	305	0.00	2.05	35.04
mp-2075	{'Si': 6.0, 'N': 8.0}	14	3.95	118.07	249	293	3.33	1.97	34.85
mp-12892	{'Ca': 1.0, 'Si': 2.0}	3	2.60	61.39	87	59	0.00	1.89	34.85
mp-13136	{'W': 1.0, 'C': 1.0}	2	15.42	21.08	153	365	0.00	1.97	34.50
mp-883	{'Ho': 1.0, 'N': 1.0}	2	10.23	29.04	126	164	0.24	1.97	34.27
mp-1018028	{'Ti': 1.0, 'S': 1.0}	2	4.44	29.88	101	141	0.00	2.07	34.09
mp-7631	{'Si': 6.0, 'C': 6.0}	12	3.17	125.96	187	213	2.11	1.85	34.07
mp-24417	{'Mo': 2.0, 'H': 2.0}	4	8.43	38.19	169	219	0.00	1.92	33.96
mp-999266	{'Re': 2.0, 'N': 2.0}	4	16.59	40.08	217	330	0.00	2.00	33.29
mp-11516	{'Nb': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	9.96	32.35	141	180	0.00	2.22	33.25
mp-11488	{'La': 1.0, 'Tl': 1.0}	2	8.95	63.71	116	77	0.00	2.18	33.13

mp-644481	{'Sc': 1.0, 'O': 1.0}	2	4.50	22.48	97	174	0.00	1.95	33.06
mp-1410	{'Dy': 1.0, 'N': 1.0}	2	9.89	29.64	122	170	0.21	1.99	32.88
mp-754333	{'Ti': 2.0, 'O': 2.0}	4	5.41	39.21	155	228	0.00	2.06	32.76
mp-974430	{'Re': 3.0, 'Ir': 1.0}	4	20.87	59.74	206	371	0.00	1.96	32.76
mp-2117	{'Tb': 1.0, 'N': 1.0}	2	9.49	30.27	119	149	0.19	1.98	32.75
mp-1019055	{'Re': 2.0, 'N': 4.0}	6	13.79	51.59	253	380	0.00	2.02	32.64
mp-973534	{'Fe': 1.0, 'Re': 1.0}	2	15.51	25.92	154	322	0.00	2.10	32.51
mp-2773	{'Be': 1.0, 'Co': 1.0}	2	6.48	17.41	118	195	0.00	2.00	32.43
mp-284	{'Al': 1.0, 'Co': 1.0}	2	6.14	23.25	118	179	0.00	2.12	32.28
mp-10255	{'Nb': 3.0, 'B': 4.0}	7	7.19	74.35	198	274	0.00	1.95	32.14
mp-10141	{'Sm': 1.0, 'B': 2.0}	3	7.36	38.81	109	136	0.00	1.67	32.07
mp-568384	{'Sc': 2.0, 'B': 4.0}	6	3.85	57.47	138	174	0.00	1.79	31.93
mp-6933	{'Mn': 1.0, 'N': 1.0}	2	6.47	17.71	121	131	0.00	2.05	31.65
mp-20738	{'Fe': 1.0, 'Si': 2.0}	3	4.95	37.59	124	183	0.00	2.08	31.61
mp-1001581	{'Li': 1.0, 'C': 6.0}	7	2.16	60.63	118	152	0.00	1.72	31.59
mp-21008	{'Ni': 3.0, 'Ge': 1.0}	4	9.01	45.85	84	175	0.00	0.99	31.56
mp-1009731	{'Re': 1.0, 'C': 1.0}	2	16.71	19.70	150	403	0.00	1.97	31.34
mp-1252	{'Zr': 1.0, 'Be': 2.0}	3	4.43	40.96	94	119	0.00	1.75	31.14
mp-865562	{'Be': 3.0, 'Ru': 1.0}	4	5.60	37.96	125	182	0.00	1.76	31.12
mp-2593	{'Al': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	7.47	45.16	85	177	0.00	1.11	31.08
mp-576	{'B': 13.0, 'C': 2.0}	15	2.44	112.06	159	222	0.00	1.57	31.06
mp-11279	{'Ti': 1.0, 'Be': 1.0}	2	3.75	25.17	75	126	0.00	1.76	30.81
mp-9947	{'Si': 7.0, 'C': 7.0}	14	3.17	146.96	187	213	2.14	1.85	30.74
mp-11531	{'V': 1.0, 'Ni': 2.0}	3	8.17	34.23	86	210	0.00	1.30	30.67
mp-984718	{'B': 2.0, 'As': 2.0}	4	5.10	55.86	126	131	1.18	1.95	30.64
mp-991	{'W': 1.0, 'N': 1.0}	2	15.77	20.83	151	375	0.00	2.06	30.43
mp-974435	{'Re': 3.0, 'N': 1.0}	4	18.95	50.18	198	361	0.00	1.96	30.41
mp-316	{'Mn': 1.0, 'V': 1.0}	2	7.41	23.74	122	243	0.00	2.16	30.31
mp-1002183	{'Tc': 1.0, 'B': 1.0}	2	8.85	20.42	114	344	0.00	1.93	30.23
mp-2678	{'V': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	14.26	28.65	141	243	0.00	2.11	30.22
mp-30482	{'Ca': 3.0, 'Tl': 1.0}	4	4.03	133.60	97	48	0.00	1.94	30.14
mp-570991	{'Ti': 1.0, 'Si': 2.0}	3	4.07	42.49	104	138	0.00	2.00	30.06
mp-2680	{'La': 1.0, 'B': 6.0}	7	4.72	71.73	130	174	0.00	1.59	30.03
mp-569376	{'Fe': 1.0, 'B': 2.0}	3	5.90	21.82	125	260	0.00	1.89	29.93
mp-30811	{'Ni': 4.0, 'W': 1.0}	5	11.89	58.46	98	234	0.00	1.00	29.86
mp-1019054	{'Re': 2.0, 'C': 4.0}	6	11.99	58.25	193	342	0.00	1.82	29.86
mp-534	{'B': 13.0, 'N': 2.0}	15	2.59	108.04	161	243	0.00	1.60	29.69
mp-11507	{'Ni': 4.0, 'Mo': 1.0}	5	9.44	58.19	91	223	0.00	1.01	29.67
mp-1018061	{'Fe': 1.0, 'H': 3.0}	4	5.49	17.81	131	207	0.00	1.64	29.52
mp-1076	{'K': 1.0, 'B': 6.0}	7	2.29	75.43	107	137	0.00	1.69	29.43
mp-7599	{'Be': 4.0, 'O': 4.0}	8	2.85	58.20	139	171	7.35	1.75	29.36
mp-830	{'Ga': 1.0, 'N': 1.0}	2	5.92	23.48	104	177	1.90	2.06	29.24
mp-15809	{'Cr': 4.0, 'B': 2.0}	6	6.74	56.55	185	289	0.00	2.05	29.18
mp-1007881	{'Fe': 2.0, 'B': 2.0}	4	6.89	32.11	151	239	0.00	1.95	29.15
mp-784630	{'Ni': 2.0, 'Mo': 1.0}	3	9.44	37.51	97	233	0.00	1.49	29.03
mp-11277	{'Sc': 1.0, 'Be': 5.0}	6	2.40	62.34	104	108	0.00	1.72	28.93
mp-12120	{'Fe': 2.0, 'N': 2.0}	4	7.14	32.50	167	276	0.00	2.10	28.90
mp-579	{'Cr': 1.0, 'C': 1.0}	2	6.13	17.33	108	208	0.00	2.01	28.81
mp-10142	{'Ta': 3.0, 'B': 4.0}	7	13.28	73.26	208	296	0.00	1.83	28.77
mp-650	{'Be': 5.0, 'Pd': 1.0}	6	4.68	53.80	132	146	0.00	1.72	28.53
mp-1009834	{'Al': 2.0, 'Ru': 1.0}	3	6.12	42.09	122	155	0.00	2.08	28.43

mp-11572	{'Ta': 1.0, 'Tc': 1.0}	2	14.26	32.49	130	255	0.00	2.09	28.42
mp-1008487	{'B': 2.0, 'W': 2.0}	4	15.32	42.20	186	341	0.00	1.99	28.38
mp-10118	{'Mn': 3.0, 'B': 4.0}	7	6.15	56.15	167	234	0.00	1.81	28.29
mp-12982	{'Sc': 1.0, 'As': 1.0}	2	5.08	39.15	85	88	0.00	2.01	28.26
mp-570641	{'Si': 8.0, 'C': 8.0}	16	3.17	168.07	187	214	2.02	1.85	28.14
mp-567505	{'Si': 8.0, 'C': 8.0}	16	3.17	168.05	187	214	1.89	1.85	28.14
mp-984	{'B': 2.0, 'N': 2.0}	4	1.96	42.13	75	103	4.49	1.65	28.11
mp-570604	{'Ta': 2.0, 'N': 2.0}	4	14.80	43.74	179	347	0.00	1.97	28.04
mp-972845	{'Si': 1.0, 'Mo': 1.0}	2	6.87	29.96	103	199	0.00	2.10	27.99
mp-1077	{'B': 4.0, 'Ru': 2.0}	6	7.47	54.56	168	286	0.00	1.89	27.80
mp-1017987	{'Tc': 3.0, 'N': 1.0}	4	10.46	48.91	182	323	0.00	2.22	27.77
mp-2540	{'V': 1.0, 'Tc': 1.0}	2	8.93	27.71	125	254	0.00	2.24	27.67
mp-1008625	{'W': 2.0, 'C': 1.0}	3	16.51	38.19	160	303	0.00	2.01	27.49
mp-998908	{'Ti': 1.0, 'N': 1.0}	2	4.22	24.37	85	222	0.00	2.01	27.47
mp-11335	{'Be': 1.0, 'Se': 1.0}	2	4.89	29.85	76	82	0.07	1.80	27.46
mp-999357	{'Nb': 2.0, 'N': 2.0}	4	7.98	44.50	150	247	0.00	2.04	27.42
mp-451	{'Zr': 1.0, 'B': 1.0}	2	5.72	29.64	80	158	0.00	1.83	27.35
mp-344	{'B': 4.0, 'N': 4.0}	8	2.54	64.83	116	179	3.50	1.66	27.23
mp-22746	{'Co': 1.0, 'Si': 1.0}	2	6.72	21.52	115	196	0.00	2.19	27.17
mp-20318	{'Mn': 4.0, 'B': 2.0}	6	7.61	52.67	175	320	0.00	1.96	27.09
mp-2553	{'Hf': 1.0, 'Be': 2.0}	3	8.28	39.41	103	128	0.00	1.71	27.05
mp-422	{'Be': 1.0, 'S': 1.0}	2	2.36	28.96	58	80	3.24	1.78	27.01
mp-1014307	{'Zr': 2.0, 'C': 2.0}	4	6.51	52.69	120	209	0.00	1.89	26.86
mp-717	{'B': 4.0, 'O': 6.0}	10	3.02	76.67	153	196	8.37	1.83	26.85
mp-1890	{'B': 4.0, 'Mo': 4.0}	8	8.48	83.65	200	311	0.00	1.98	26.80
mp-21343	{'Ce': 1.0, 'B': 6.0}	7	4.89	69.65	121	175	0.00	1.57	26.70
mp-1082	{'V': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	18.41	56.59	215	320	0.00	2.27	26.51
mp-999377	{'Nb': 2.0, 'C': 2.0}	4	7.24	48.09	137	248	0.00	2.02	26.49
mp-999117	{'Tc': 2.0, 'N': 2.0}	4	9.46	39.31	175	352	0.00	2.19	26.46
mp-251	{'Ta': 1.0, 'N': 1.0}	2	14.97	21.63	127	327	0.00	1.98	26.45
mp-984728	{'B': 2.0, 'C': 2.0}	4	2.80	27.09	83	273	0.00	1.57	26.38
mp-999259	{'Ru': 2.0, 'C': 2.0}	4	8.89	42.23	168	256	0.00	2.18	26.34
mp-7991	{'B': 2.0, 'N': 2.0}	4	1.82	45.17	69	95	4.27	1.65	26.28
mp-20027	{'Fe': 2.0, 'P': 4.0}	6	5.13	76.29	154	180	0.47	2.10	26.24
mp-604884	{'B': 2.0, 'N': 2.0}	4	2.13	38.73	75	102	4.42	1.65	26.19
mp-190	{'Re': 1.0, 'O': 3.0}	4	7.11	54.71	126	243	0.00	1.96	26.16
mp-11283	{'Zr': 1.0, 'Be': 5.0}	6	3.62	62.46	111	126	0.00	1.72	26.15
mp-571438	{'Be': 12.0, 'V': 1.0}	13	2.45	107.87	144	130	0.00	1.71	26.13
mp-10020	{'Sc': 1.0, 'C': 1.0}	2	3.68	25.72	71	142	0.00	1.87	26.09
mp-1021503	{'Si': 2.0, 'O': 4.0}	6	3.62	55.18	137	267	4.59	2.02	26.04
mp-7088	{'Ta': 2.0, 'C': 1.0}	3	14.77	42.04	138	256	0.00	1.93	26.03
mp-570690	{'Si': 9.0, 'C': 9.0}	18	3.17	189.07	187	213	1.96	1.85	26.01
mp-1590	{'Be': 12.0, 'Cr': 1.0}	13	2.49	106.68	144	126	0.00	1.70	25.90
mp-242	{'Sr': 1.0, 'B': 6.0}	7	3.42	74.10	111	147	0.04	1.67	25.89
mp-629015	{'B': 2.0, 'N': 2.0}	4	2.07	39.79	73	101	4.00	1.65	25.76
mp-20812	{'In': 1.0, 'N': 1.0}	2	8.19	26.11	108	255	0.00	2.13	25.74
mp-2658	{'Al': 1.0, 'Fe': 1.0}	2	5.79	23.75	95	175	0.00	2.07	25.72
mp-11276	{'Be': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	8.59	21.63	100	207	0.00	1.92	25.71
mp-14019	{'Ni': 2.0, 'B': 2.0}	4	7.17	32.21	111	259	0.00	1.61	25.68
mp-1025010	{'Be': 5.0, 'Fe': 1.0}	6	3.37	49.65	113	132	0.00	1.73	25.65
mp-1002165	{'Ge': 1.0, 'C': 1.0}	2	6.66	21.11	108	167	0.00	2.15	25.51

mp-998893	{'Y': 1.0, 'C': 1.0}	2	5.07	33.04	69	150	0.00	1.78	25.49
mp-23703	{'Li': 1.0, 'H': 1.0}	2	0.82	16.00	43	37	3.18	1.69	25.49
mp-12083	{'Cr': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	18.65	55.98	214	307	0.00	2.29	25.44
mp-9258	{'Si': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.42	90.39	206	320	4.46	2.02	25.39
mp-1475	{'Be': 12.0, 'Mo': 1.0}	13	3.10	109.43	150	141	0.00	1.69	25.31
mp-291	{'Ti': 1.0, 'Os': 1.0}	2	13.33	29.65	134	248	0.00	2.26	25.31
mp-570491	{'Ta': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	12.03	49.26	96	222	0.00	1.29	25.29
mp-10201	{'Ge': 2.0, 'Mo': 1.0}	3	8.65	46.31	135	155	0.00	2.21	25.26
mp-2243	{'Nb': 1.0, 'S': 1.0}	2	6.55	31.70	96	180	0.00	2.14	25.20
mp-12798	{'Ni': 3.0, 'Pt': 1.0}	4	12.69	48.57	92	206	0.00	1.20	25.19
mp-2605	{'Ca': 1.0, 'O': 1.0}	2	3.29	28.33	74	105	3.69	2.05	25.14
mp-1009769	{'Ru': 1.0, 'N': 1.0}	2	9.38	20.36	128	239	0.00	2.25	25.04
mp-12762	{'Pr': 1.0, 'B': 6.0}	7	4.80	71.23	115	174	0.00	1.58	25.00
mp-2091	{'V': 6.0, 'B': 4.0}	10	5.85	99.10	199	256	0.00	2.05	24.97
mp-1018850	{'Os': 2.0, 'C': 4.0}	6	12.41	57.33	203	362	0.00	2.05	24.97
mp-10144	{'B': 2.0, 'W': 1.0}	3	12.75	26.76	141	295	0.00	1.93	24.96
mp-10015	{'Si': 1.0, 'Os': 1.0}	2	13.99	25.92	130	295	0.00	2.17	24.71
mp-1215	{'Ti': 2.0, 'O': 1.0}	3	5.01	37.01	106	184	0.00	2.09	24.67
mp-11513	{'Nb': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	8.98	49.72	89	209	0.00	1.35	24.66
mp-1018166	{'Al': 1.0, 'Tc': 2.0}	3	8.66	42.74	127	224	0.00	2.14	24.54
mp-979413	{'W': 3.0, 'C': 1.0}	4	16.58	56.45	169	239	0.00	2.04	24.54
mp-1591	{'Al': 4.0, 'C': 3.0}	7	2.93	81.56	113	160	1.34	1.86	24.50
mp-1339	{'Nb': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	18.30	60.77	204	313	0.00	2.30	24.49
mp-1842	{'Nb': 1.0, 'Al': 3.0}	4	4.50	64.13	105	127	0.00	2.02	24.36
mp-1487	{'Al': 1.0, 'Ni': 1.0}	2	5.91	24.09	72	162	0.00	1.71	24.28
mp-568656	{'Si': 10.0, 'C': 10.0}	20	3.17	209.91	187	213	2.04	1.85	24.24
mp-265	{'Ta': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	20.76	60.60	212	325	0.00	2.31	24.19
mp-343	{'Pr': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.23	35.58	90	133	0.41	2.06	24.18
mp-542569	{'Al': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	7.83	27.15	103	202	0.00	2.15	24.12
mp-984717	{'Be': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	7.69	39.96	78	63	0.00	1.14	24.11
mp-10909	{'Al': 1.0, 'Re': 2.0}	3	15.21	43.61	139	255	0.00	2.02	24.10
mp-930	{'Zr': 1.0, 'P': 1.0}	2	5.45	37.23	76	134	0.00	1.98	24.07
mp-1032	{'Ta': 4.0, 'B': 2.0}	6	14.98	82.64	178	244	0.00	1.91	24.06
mp-875	{'Al': 1.0, 'Os': 1.0}	2	13.12	27.49	118	236	0.00	2.10	24.03
mp-2749	{'Ti': 2.0, 'Be': 4.0}	6	3.29	66.45	106	124	0.00	1.81	23.93
mp-771	{'Mn': 1.0, 'Al': 1.0}	2	5.13	26.53	81	141	0.00	2.00	23.79
mp-2807	{'Sc': 1.0, 'P': 1.0}	2	3.36	37.58	63	98	0.00	1.95	23.78
mp-1007819	{'Co': 1.0, 'W': 1.0}	2	14.85	27.14	128	210	0.00	2.16	23.75
mp-755483	{'Al': 2.0, 'O': 3.0}	5	3.64	46.54	110	213	4.10	1.91	23.75
mp-997618	{'B': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	5.97	36.85	84	99	1.01	2.08	23.66
mp-815	{'Ga': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	8.94	45.67	77	180	0.00	1.15	23.63
mp-364	{'Al': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	7.93	27.18	102	196	0.00	2.15	23.60
mp-2554	{'Al': 3.0, 'V': 1.0}	4	3.71	58.96	100	120	0.00	2.05	23.53
mp-12605	{'Re': 1.0, 'Si': 2.0}	3	10.02	40.17	121	233	0.00	2.02	23.46
mp-24728	{'V': 1.0, 'H': 2.0}	3	4.70	18.72	91	175	0.00	1.72	23.46
mp-21264	{'Os': 2.0, 'N': 4.0}	6	13.07	55.47	223	359	0.00	2.21	23.40
mp-1009458	{'Nb': 1.0, 'C': 1.0}	2	6.07	28.71	79	197	0.00	1.94	23.40
mp-1929	{'Nd': 1.0, 'B': 6.0}	7	4.91	70.74	110	174	0.00	1.57	23.37
mp-1885	{'Al': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	13.24	27.48	116	229	0.00	2.10	23.34
mp-568912	{'Be': 12.0, 'Nb': 1.0}	13	2.96	112.87	138	133	0.00	1.68	23.28
mp-1699	{'Al': 1.0, 'Cr': 2.0}	3	5.75	37.83	103	186	0.00	2.04	23.18

mp-30744	{'Ir': 2.0, 'W': 2.0}	4	20.52	60.87	183	334	0.00	2.14	23.12
mp-1279	{'Ta': 3.0, 'N': 3.0}	6	14.00	69.39	182	307	0.00	1.96	23.10
mp-990076	{'P': 2.0, 'O': 5.0}	7	3.94	59.86	149	233	0.00	2.09	23.02
mp-19390	{'W': 1.0, 'O': 3.0}	4	6.68	57.63	125	228	1.18	2.12	22.99
mp-1001916	{'Hf': 1.0, 'N': 1.0}	2	10.80	29.59	87	197	0.00	1.82	22.95
mp-1018121	{'Ti': 1.0, 'Pd': 2.0}	3	9.20	47.06	129	140	0.00	2.21	22.86
mp-2025	{'Hf': 1.0, 'Be': 5.0}	6	6.09	60.97	120	131	0.00	1.71	22.74
mp-1010071	{'Cr': 1.0, 'Co': 1.0}	2	7.95	23.18	105	210	0.00	2.18	22.58
mp-305	{'Ti': 1.0, 'Fe': 1.0}	2	6.64	25.93	97	194	0.00	2.19	22.53
mp-1281	{'V': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	14.48	27.88	123	274	0.00	2.19	22.44
mp-568827	{'Be': 12.0, 'W': 1.0}	13	4.44	109.08	158	144	0.00	1.70	22.44
mp-1756	{'Th': 1.0, 'B': 6.0}	7	7.10	69.47	122	197	0.00	1.58	22.43
mp-381	{'Si': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	8.45	25.37	105	248	0.00	2.20	22.39
mp-11452	{'Hf': 1.0, 'Os': 1.0}	2	17.69	34.61	117	229	0.00	2.09	22.37
mp-1953	{'Ti': 1.0, 'Al': 1.0}	2	3.83	32.42	70	115	0.00	2.06	22.27
mp-11481	{'Mo': 2.0, 'Ir': 2.0}	4	15.89	60.22	174	310	0.00	2.23	22.26
mp-1565	{'Zr': 1.0, 'O': 2.0}	3	5.99	34.15	103	235	3.30	2.04	22.23
mp-542915	{'Ti': 1.0, 'Al': 3.0}	4	3.37	63.55	89	107	0.00	2.00	22.22
mp-1019052	{'Re': 3.0, 'N': 3.0}	6	14.76	67.59	180	368	0.00	1.96	22.09
mp-1007778	{'Tl': 1.0, 'N': 1.0}	2	9.90	36.63	110	67	0.09	2.27	21.98
mp-1709	{'U': 2.0, 'Ti': 1.0}	3	15.63	55.65	119	130	0.00	1.92	21.94
mp-2031	{'Be': 4.0, 'Cu': 2.0}	6	5.05	53.68	125	137	0.00	1.87	21.73
mp-1960	{'Li': 2.0, 'O': 1.0}	3	1.96	25.28	70	78	4.99	1.91	21.69
mp-592	{'Ti': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	8.42	29.37	107	212	0.00	2.31	21.60
mp-20874	{'Eu': 1.0, 'B': 6.0}	7	4.96	72.54	103	155	0.00	1.55	21.59
mp-542595	{'Ge': 2.0, 'W': 1.0}	3	11.80	46.32	137	172	0.00	2.24	21.53
mp-985578	{'Al': 1.0, 'Fe': 1.0}	2	4.61	29.81	75	85	0.00	2.06	21.49
mp-11270	{'Mn': 4.0, 'Be': 8.0}	12	4.82	100.55	162	163	0.00	1.80	21.43
mp-865	{'Ca': 1.0, 'B': 6.0}	7	2.44	71.48	86	149	0.18	1.65	21.41
mp-1222	{'Cr': 3.0, 'Si': 6.0}	9	5.02	107.32	156	196	0.39	2.05	21.41
mp-999317	{'Os': 2.0, 'N': 2.0}	4	15.30	44.33	195	321	0.00	2.36	21.38
mp-1220	{'Be': 5.0, 'Au': 1.0}	6	7.01	57.29	120	138	0.00	1.68	21.35
mp-2850	{'B': 4.0, 'Os': 2.0}	6	12.65	55.63	166	311	0.00	1.89	21.34
mp-1114	{'V': 2.0, 'P': 2.0}	4	5.07	53.61	112	171	0.00	2.14	21.32
mp-30438	{'Be': 8.0, 'Cr': 4.0}	12	4.41	105.52	158	183	0.00	1.84	21.30
mp-1007761	{'H': 2.0, 'W': 2.0}	4	17.11	35.89	155	281	0.00	1.89	21.27
mp-1008798	{'Re': 1.0, 'N': 2.0}	3	12.35	28.81	127	328	0.00	1.99	21.22
mp-863709	{'Ir': 3.0, 'Rh': 1.0}	4	19.50	57.88	202	324	0.00	2.38	21.21
mp-1143	{'Al': 4.0, 'O': 6.0}	10	3.87	87.42	147	232	6.04	1.94	21.19
mp-345	{'Hf': 1.0, 'B': 1.0}	2	11.10	28.31	82	175	0.00	1.79	21.04
mp-569803	{'B': 8.0, 'W': 4.0}	12	12.27	111.19	224	321	0.00	1.89	21.00
mp-1008642	{'U': 1.0, 'C': 2.0}	3	11.13	39.08	99	195	0.00	1.77	20.97
mp-11191	{'Cr': 3.0, 'Si': 6.0}	9	5.02	107.31	154	181	0.41	2.05	20.93
mp-1008275	{'Cr': 3.0, 'Ni': 1.0}	4	7.46	47.77	98	124	0.00	1.72	20.93
mp-978275	{'Mg': 4.0, 'B': 28.0}	32	2.62	253.63	183	184	1.46	1.64	20.91
mp-1009077	{'Fe': 1.0, 'H': 1.0}	2	7.10	13.30	91	177	0.00	1.92	20.86
mp-2582	{'Ti': 2.0, 'Si': 4.0}	6	4.06	85.07	111	143	0.00	2.01	20.72
mp-1009545	{'Pa': 1.0, 'N': 1.0}	2	13.37	30.43	94	227	0.00	1.94	20.64
mp-550893	{'Hf': 1.0, 'O': 2.0}	3	10.69	32.69	115	248	3.91	1.98	20.56
mp-1315	{'Mg': 1.0, 'S': 1.0}	2	2.62	35.74	52	74	2.96	1.91	20.52
mp-1009823	{'Be': 1.0, 'B': 2.0}	3	2.38	21.39	63	187	0.00	1.70	20.51

mp-567842	{'Ta': 1.0, 'Be': 12.0}	13	4.28	112.24	143	137	0.00	1.68	20.49
mp-2311	{'Nb': 3.0, 'O': 3.0}	6	7.01	77.39	140	243	0.00	2.07	20.49
mp-994	{'Y': 1.0, 'P': 1.0}	2	4.35	45.81	59	100	0.00	1.94	20.48
mp-2838	{'U': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	11.42	77.31	91	207	0.00	1.19	20.45
mp-9923	{'V': 2.0, 'P': 4.0}	6	4.56	82.27	124	152	0.00	2.12	20.39
mp-869	{'Ta': 1.0, 'Al': 3.0}	4	6.81	63.82	104	133	0.00	1.97	20.39
mp-834	{'Th': 1.0, 'N': 1.0}	2	11.79	34.66	88	179	0.00	1.96	20.34
mp-11190	{'V': 3.0, 'Si': 6.0}	9	4.64	115.00	147	175	0.00	2.07	20.33
mp-10711	{'V': 3.0, 'Si': 6.0}	9	4.64	114.98	147	174	0.00	2.07	20.32
mp-2536	{'Ni': 4.0, 'B': 2.0}	6	8.11	52.51	100	250	0.00	1.39	20.24
mp-1185	{'V': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	10.74	55.60	157	251	0.00	2.34	20.24
mp-10196	{'Ta': 2.0, 'N': 1.0}	3	15.27	40.87	121	272	0.00	1.97	20.24
mp-1002222	{'Tl': 1.0, 'N': 1.0}	2	11.98	30.27	109	186	0.00	2.23	20.22
mp-1164	{'Th': 1.0, 'C': 1.0}	2	10.56	38.38	73	139	0.00	1.78	20.08
mp-12648	{'Ti': 2.0, 'Be': 17.0}	19	2.48	166.76	143	127	0.00	1.72	19.95
mp-10688	{'Ce': 1.0, 'O': 1.0}	2	8.37	30.98	85	126	0.00	2.05	19.95
mp-12778	{'V': 1.0, 'Os': 1.0}	2	14.49	27.64	115	284	0.00	2.21	19.94
mp-999264	{'Re': 2.0, 'N': 2.0}	4	14.51	45.81	138	294	0.00	1.96	19.89
mp-11607	{'Si': 6.0, 'N': 8.0}	14	3.41	136.57	149	252	4.10	1.90	19.89
mp-567580	{'Pa': 1.0, 'C': 1.0}	2	12.36	32.66	79	172	0.00	1.78	19.88
mp-15660	{'Nb': 4.0, 'C': 3.0}	7	7.58	89.36	144	289	0.00	2.01	19.87
mp-1009133	{'Mn': 1.0, 'Co': 1.0}	2	8.14	23.24	99	195	0.00	2.21	19.87
mp-1009832	{'Ta': 1.0, 'C': 1.0}	2	11.31	28.32	81	225	0.00	1.82	19.86
mp-1017529	{'V': 1.0, 'Co': 3.0}	4	8.67	43.61	161	297	0.00	2.43	19.83
mp-6996	{'Sm': 1.0, 'B': 6.0}	7	5.11	69.92	100	175	0.00	1.57	19.78
mp-1022724	{'Ca': 1.0, 'C': 4.0}	5	2.94	49.83	80	143	0.00	1.74	19.74
mp-949	{'Co': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	15.54	27.13	108	216	0.00	2.08	19.71
mp-998897	{'Y': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	6.35	55.08	67	54	0.00	2.01	19.69
mp-563	{'C': 6.0, 'N': 8.0}	14	3.92	78.00	174	364	0.94	1.89	19.67
mp-1014303	{'Cr': 3.0, 'N': 2.0}	5	6.45	47.35	143	239	0.00	2.21	19.65
mp-945	{'Ni': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	15.72	26.82	91	213	0.00	1.82	19.63
mp-24237	{'Sc': 1.0, 'H': 2.0}	3	2.86	27.30	63	97	0.00	1.71	19.59
mp-864647	{'Hf': 4.0, 'N': 2.0}	6	13.24	93.08	141	195	0.00	1.87	19.49
mp-862847	{'Pa': 2.0, 'B': 6.0}	8	9.88	88.56	140	198	0.00	1.70	19.44
mp-2028	{'Be': 4.0, 'Nb': 2.0}	6	5.27	69.92	103	159	0.00	1.77	19.43
mp-30441	{'Be': 17.0, 'Nb': 2.0}	19	3.34	168.63	152	140	0.00	1.70	19.40
mp-2577	{'Mn': 3.0, 'Rh': 1.0}	4	9.48	46.87	133	114	0.00	2.11	19.39
mp-568696	{'Si': 14.0, 'C': 14.0}	28	3.17	293.83	187	213	1.92	1.85	19.37
mp-1008929	{'Fe': 1.0, 'N': 1.0}	2	6.83	16.98	89	195	0.00	2.07	19.27
mp-9339	{'Nb': 2.0, 'P': 2.0}	4	6.39	64.42	109	188	0.00	2.15	19.27
mp-862589	{'Re': 6.0, 'Pt': 2.0}	8	20.81	120.27	202	324	0.00	2.00	19.26
mp-1915	{'Fe': 4.0, 'B': 2.0}	6	7.49	54.31	145	227	0.00	2.03	19.26
mp-11281	{'Be': 8.0, 'V': 4.0}	12	3.94	116.38	138	160	0.00	1.83	19.25
mp-7832	{'B': 4.0, 'W': 4.0}	8	15.33	84.33	196	342	0.00	1.99	19.22
mp-12110	{'Ta': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	14.58	32.12	109	245	0.00	2.21	19.19
mp-11322	{'Zr': 2.0, 'Si': 2.0}	4	5.57	71.15	92	142	0.00	2.00	19.17
mp-1550	{'Al': 1.0, 'P': 1.0}	2	2.30	41.76	47	85	1.82	1.96	19.09
mp-634965	{'Nb': 1.0, 'O': 1.0}	2	5.45	33.18	73	143	0.00	2.11	19.09
mp-1017546	{'Zr': 2.0, 'N': 2.0}	4	6.83	51.16	102	234	0.00	1.96	18.99
mp-952	{'Mo': 1.0, 'Pt': 2.0}	3	17.39	46.42	137	272	0.00	2.20	18.89
mvc-11548	{'Cr': 1.0, 'O': 3.0}	4	3.37	49.30	101	224	0.00	2.30	18.86

mp-1007992	{'Cr': 2.0, 'H': 2.0}	4	6.06	29.04	114	196	0.00	2.00	18.86
mp-12585	{'Cr': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	10.85	55.23	151	230	0.00	2.34	18.80
mp-979289	{'Ta': 1.0, 'W': 3.0}	4	18.29	66.50	139	255	0.00	2.03	18.78
mp-1719	{'Pu': 1.0, 'N': 1.0}	2	14.20	30.16	91	154	0.00	1.95	18.75
mp-20689	{'Nb': 6.0, 'B': 4.0}	10	7.75	128.66	168	240	0.00	2.04	18.71
mp-1522	{'Fe': 2.0, 'S': 4.0}	6	4.89	81.42	125	150	0.98	2.18	18.68
mp-804	{'Ga': 2.0, 'N': 2.0}	4	5.92	46.94	105	172	1.74	2.06	18.66
mp-2449	{'Nb': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	11.15	59.81	146	249	0.00	2.32	18.65
mp-2657	{'Ti': 2.0, 'O': 4.0}	6	4.13	64.29	110	209	1.77	2.01	18.64
mp-12104	{'Nb': 3.0, 'Si': 6.0}	9	5.58	133.15	140	175	0.00	2.04	18.62
mp-2478	{'Nb': 3.0, 'Si': 6.0}	9	5.58	133.13	140	175	0.00	2.04	18.62
mp-1431	{'Mn': 4.0, 'Si': 4.0}	8	5.97	92.33	141	210	0.00	2.03	18.54
mp-1359	{'Nb': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	14.61	32.42	105	259	0.00	2.20	18.54
mp-862984	{'Pm': 2.0, 'B': 6.0}	8	6.35	92.84	113	146	0.00	1.66	18.54
mp-983590	{'Be': 3.0, 'Fe': 1.0}	4	4.04	34.04	82	155	0.00	1.78	18.54
mp-7754	{'Si': 2.0, 'Ru': 1.0}	3	5.96	43.79	92	168	0.00	2.13	18.50
mp-973935	{'Os': 1.0, 'N': 2.0}	3	10.57	34.29	117	210	0.00	2.13	18.44
mp-15799	{'Nb': 4.0, 'N': 4.0}	8	8.00	88.78	156	295	0.00	2.04	18.42
mp-1008278	{'Cr': 3.0, 'Ni': 1.0}	4	7.84	45.47	79	216	0.00	1.51	18.41
mp-8282	{'Ti': 4.0, 'N': 2.0}	6	4.88	74.66	117	204	0.00	2.08	18.41
mp-753890	{'Ni': 2.0, 'H': 1.0}	3	8.34	23.59	72	197	0.00	1.41	18.37
mp-1019272	{'Ta': 2.0, 'N': 4.0}	6	10.94	63.43	149	254	0.00	1.99	18.36
mp-2493	{'Ce': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.94	32.22	76	146	0.00	2.02	18.34
mp-974625	{'Re': 6.0, 'Ru': 2.0}	8	18.53	118.22	188	351	0.00	2.00	18.33
mp-7927	{'Nb': 4.0, 'N': 5.0}	9	7.05	103.98	157	270	0.00	2.05	18.31
mp-2676	{'Ta': 2.0, 'Be': 4.0}	6	9.52	69.40	118	168	0.00	1.73	18.30
mp-2439	{'Zr': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	8.52	74.98	86	184	0.00	1.36	18.28
mp-999307	{'Os': 2.0, 'N': 2.0}	4	15.16	44.75	171	317	0.00	2.33	18.27
mp-867780	{'Al': 3.0, 'Cr': 1.0}	4	3.82	57.86	83	107	0.00	2.00	18.25
mp-607371	{'Ru': 2.0, 'N': 4.0}	6	7.78	55.11	157	298	0.00	2.20	18.22
mvc-15387	{'W': 2.0, 'N': 2.0}	4	15.91	41.30	147	328	0.00	2.06	18.20
mp-1677	{'Be': 8.0, 'Mo': 4.0}	12	6.04	125.26	150	199	0.00	1.83	18.15
mp-8938	{'Si': 6.0, 'Mo': 3.0}	9	6.20	122.14	149	207	0.22	2.09	18.11
mp-558733	{'Si': 6.0, 'O': 12.0}	18	4.08	146.84	192	265	5.28	2.05	18.09
mp-1057	{'Al': 3.0, 'Ni': 2.0}	5	4.77	69.08	86	130	0.00	1.80	18.09
mp-1009820	{'Sn': 1.0, 'C': 1.0}	2	6.60	32.90	85	121	0.63	2.29	18.00
mp-1216	{'Yb': 1.0, 'O': 1.0}	2	11.72	26.78	89	128	3.53	2.00	17.98
mp-865212	{'Fe': 6.0, 'Re': 2.0}	8	12.87	91.25	177	310	0.00	2.02	17.95
mp-2802	{'Hf': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	13.60	34.15	97	197	0.00	2.16	17.95
mp-2501	{'B': 2.0, 'Mo': 4.0}	6	9.11	73.92	141	293	0.00	2.08	17.91
mp-570673	{'Sc': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	7.34	76.61	78	159	0.00	1.31	17.91
mp-1251	{'V': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	9.27	27.56	96	233	0.00	2.27	17.86
mp-1020	{'Ta': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	13.66	59.52	153	260	0.00	2.33	17.85
mp-1021323	{'Li': 1.0, 'C': 12.0}	13	2.02	124.22	98	125	0.00	1.67	17.82
mp-569167	{'Nb': 4.0, 'N': 3.0}	7	8.04	85.45	140	280	0.00	2.03	17.73
mp-2364	{'Pa': 1.0, 'O': 2.0}	3	10.75	40.64	103	203	0.00	2.03	17.72
mp-729	{'Cr': 6.0, 'Si': 2.0}	8	6.63	92.27	154	249	0.00	2.16	17.72
mp-744	{'Ho': 1.0, 'P': 1.0}	2	7.25	44.86	62	88	0.00	1.89	17.72
mp-567551	{'Si': 16.0, 'C': 16.0}	32	3.17	335.65	187	214	2.06	1.85	17.72
mp-754624	{'Al': 4.0, 'O': 6.0}	10	3.68	92.02	126	190	5.80	1.93	17.70
mp-11506	{'Ni': 6.0, 'Mo': 2.0}	8	9.51	94.97	89	230	0.00	1.18	17.69

mp-256	{'La': 1.0, 'N': 1.0}	2	6.79	37.41	67	122	0.11	1.99	17.68
mp-9969	{'Sc': 2.0, 'Si': 2.0}	4	3.34	72.71	70	101	0.00	1.93	17.62
mp-1008632	{'V': 2.0, 'C': 1.0}	3	5.76	32.85	90	219	0.00	2.08	17.61
mp-11522	{'Ni': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	9.48	51.66	76	163	0.00	1.44	17.59
mp-7283	{'La': 4.0, 'B': 16.0}	20	5.41	223.55	152	173	0.00	1.61	17.57
mp-2225	{'Be': 8.0, 'Fe': 4.0}	12	4.77	102.88	146	158	0.00	1.86	17.57
mp-999192	{'Si': 2.0, 'Ni': 2.0}	4	6.18	46.63	76	189	0.00	1.63	17.50
mp-554462	{'Ti': 2.0, 'S': 2.0}	4	4.46	59.46	88	138	0.00	2.07	17.48
mp-13076	{'Ir': 2.0, 'N': 4.0}	6	13.03	56.14	182	295	0.00	2.21	17.48
mp-12595	{'Mo': 2.0, 'Rh': 2.0}	4	11.09	59.55	134	266	0.00	2.26	17.46
mp-998903	{'Ti': 1.0, 'N': 1.0}	2	5.59	18.39	72	258	0.00	1.99	17.40
mp-2767	{'Ti': 1.0, 'Ga': 1.0}	2	6.20	31.51	72	115	0.00	2.10	17.40
mp-19094	{'V': 2.0, 'O': 4.0}	6	4.45	61.94	119	233	0.00	2.15	17.33
mp-11515	{'Nb': 2.0, 'Rh': 2.0}	4	10.08	64.54	124	218	0.00	2.22	17.33
mp-972087	{'Zr': 1.0, 'H': 3.0}	4	5.12	30.55	86	130	0.00	1.76	17.33
mp-867838	{'Ac': 2.0, 'Au': 6.0}	8	13.76	197.47	179	77	0.00	2.23	17.32
mp-8039	{'Al': 1.0, 'F': 3.0}	4	2.89	48.22	77	126	7.69	2.03	17.31
mp-1157	{'Ta': 1.0, 'Ni': 2.0}	3	12.49	39.65	76	214	0.00	1.52	17.31
mp-1008274	{'Co': 3.0, 'W': 1.0}	4	12.81	46.75	149	272	0.00	2.27	17.29
mp-974416	{'Re': 3.0, 'W': 1.0}	4	19.98	61.69	130	335	0.00	1.95	17.27
mp-11275	{'Be': 8.0, 'Re': 4.0}	12	11.43	118.73	173	242	0.00	1.76	17.27
mp-2760	{'Nb': 6.0, 'C': 5.0}	11	7.50	136.65	161	239	0.00	2.00	17.25
mp-11541	{'Zr': 1.0, 'Os': 1.0}	2	13.12	35.63	99	209	0.00	2.26	17.22
mp-1019086	{'C': 2.0, 'N': 4.0}	6	2.55	52.11	93	83	4.79	1.98	17.21
mp-1008280	{'Cr': 1.0, 'Co': 3.0}	4	9.00	42.20	150	259	0.00	2.43	17.21
mp-1017533	{'Y': 2.0, 'N': 2.0}	4	5.60	61.04	85	143	0.21	1.94	17.20
mp-21048	{'Cr': 4.0, 'P': 4.0}	8	5.67	97.20	138	173	0.00	2.11	17.20
mp-1089	{'Ti': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	17.77	58.34	162	294	0.00	2.32	17.19
mp-2318	{'Nb': 2.0, 'C': 1.0}	3	7.65	42.97	87	219	0.00	2.00	17.17
mp-2090	{'Fe': 1.0, 'Co': 1.0}	2	8.29	22.99	91	189	0.00	2.22	17.15
mp-1014246	{'Zr': 2.0, 'B': 2.0}	4	5.71	59.30	81	166	0.00	1.86	17.15
mp-1476	{'Sc': 1.0, 'S': 1.0}	2	3.59	35.59	51	101	0.00	1.92	17.12
mp-20857	{'Co': 4.0, 'B': 4.0}	8	7.46	62.13	152	303	0.00	1.99	17.11
mp-15617	{'Cr': 10.0, 'B': 6.0}	16	6.59	147.42	196	291	0.00	2.02	17.10
mp-2014	{'Dy': 1.0, 'P': 1.0}	2	7.06	45.54	60	84	0.00	1.90	17.03
mp-867347	{'Al': 3.0, 'Tc': 1.0}	4	5.01	59.34	86	145	0.00	2.01	17.02
mp-11273	{'Be': 9.0, 'Nb': 3.0}	12	4.71	126.86	126	155	0.00	1.76	17.02
mp-569516	{'Hf': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	10.61	73.89	86	169	0.00	1.31	17.00
mp-1954	{'P': 3.0, 'N': 5.0}	8	3.51	77.07	113	131	2.65	1.98	16.99
mp-2121	{'Sc': 1.0, 'Al': 3.0}	4	3.02	69.29	71	84	0.00	2.02	16.97
mp-867212	{'Tc': 2.0, 'Os': 6.0}	8	19.29	115.14	243	378	0.00	2.42	16.94
mp-10192	{'Lu': 1.0, 'P': 1.0}	2	8.04	42.52	65	91	0.00	1.94	16.92
mp-22266	{'Gd': 1.0, 'B': 6.0}	7	5.31	69.44	91	171	0.00	1.57	16.91
mp-645	{'Tb': 1.0, 'P': 1.0}	2	6.82	46.26	58	87	0.00	1.88	16.85
mp-1008279	{'Co': 3.0, 'Mo': 1.0}	4	9.76	46.39	137	269	0.00	2.31	16.85
mp-999086	{'Tc': 2.0, 'N': 2.0}	4	8.22	45.24	117	234	0.00	2.15	16.80
mp-1008677	{'Ti': 1.0, 'O': 2.0}	3	4.68	28.34	84	250	1.12	2.09	16.77
mp-11328	{'P': 4.0, 'W': 2.0}	6	9.12	89.51	132	188	0.00	2.09	16.77
mp-1014460	{'Cr': 3.0, 'N': 4.0}	7	5.65	62.26	145	131	0.00	2.18	16.73
mp-24154	{'Nb': 1.0, 'H': 2.0}	3	6.58	23.94	81	178	0.00	1.80	16.72
mp-999388	{'Nb': 2.0, 'C': 2.0}	4	6.52	53.41	91	216	0.00	1.96	16.70

mp-20787	{'Fe': 4.0, 'B': 4.0}	8	6.95	63.75	141	291	0.00	1.95	16.64
mp-862604	{'Re': 6.0, 'Ni': 2.0}	8	18.35	111.74	175	326	0.00	1.97	16.61
mp-632442	{'Al': 4.0, 'C': 3.0}	7	3.00	79.72	89	141	0.00	1.88	16.58
mp-999502	{'Mo': 2.0, 'Pt': 2.0}	4	15.64	61.80	135	275	0.00	2.17	16.53
mp-2260	{'Fe': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	14.81	28.13	92	201	0.00	2.05	16.52
mp-11282	{'Be': 8.0, 'W': 4.0}	12	10.61	126.36	170	218	0.00	1.83	16.50
mp-871	{'Fe': 4.0, 'Si': 4.0}	8	6.33	88.02	139	211	0.17	2.08	16.45
mp-8046	{'Ta': 4.0, 'N': 5.0}	9	12.90	102.19	172	292	0.00	1.98	16.45
mp-633538	{'B': 18.0, 'C': 2.0}	20	2.42	149.87	119	195	0.00	1.60	16.42
mp-2152	{'Y': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	7.80	81.38	72	148	0.00	1.27	16.38
mp-419	{'Yb': 1.0, 'B': 6.0}	7	5.61	70.36	90	155	0.11	1.56	16.38
mp-568735	{'Si': 18.0, 'C': 18.0}	36	3.17	377.67	187	213	2.09	1.85	16.38
mp-2203	{'Y': 1.0, 'B': 6.0}	7	3.70	69.03	80	172	0.00	1.60	16.32
mp-1019319	{'Tc': 3.0, 'N': 3.0}	6	8.37	66.65	137	245	0.00	2.13	16.31
mp-974335	{'Ru': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	12.00	56.73	155	243	0.00	2.49	16.24
mp-1075	{'Sm': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	8.90	82.84	69	125	0.00	1.15	16.21
mp-1018157	{'Cr': 1.0, 'N': 1.0}	2	5.15	21.30	68	205	0.00	2.07	16.20
mp-710	{'Sm': 1.0, 'P': 1.0}	2	6.14	49.06	54	79	0.00	1.89	16.16
mp-1497	{'Ta': 3.0, 'N': 3.0}	6	13.81	70.32	143	275	0.00	1.98	16.14
mp-853	{'Er': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	9.54	80.15	72	146	0.00	1.18	16.14
mp-18337	{'Be': 24.0, 'N': 16.0}	40	2.70	270.58	186	214	3.72	1.72	16.13
mp-20211	{'Mn': 3.0, 'Si': 1.0}	4	7.08	45.25	99	204	0.00	2.02	16.11
mp-647	{'Nb': 2.0, 'S': 2.0}	4	6.56	63.28	97	180	0.00	2.14	16.10
mp-30808	{'Tb': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	9.27	81.05	70	133	0.00	1.15	16.09
mp-1438	{'Zr': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	17.49	63.40	152	266	0.00	2.32	16.05
mp-547271	{'Re': 2.0, 'O': 6.0}	8	7.13	109.10	124	238	0.00	1.96	16.00
mp-2323	{'Be': 1.0, 'Cu': 1.0}	2	6.20	19.43	70	142	0.00	1.99	16.00
mp-1776	{'U': 1.0, 'N': 2.0}	3	12.02	36.77	98	250	0.77	1.98	15.99
mp-1515	{'Zr': 2.0, 'Si': 4.0}	6	4.85	101.00	95	125	0.00	2.00	15.96
mp-1009488	{'Ni': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.21	16.74	78	259	0.00	2.04	15.95
mp-862586	{'Re': 6.0, 'Pd': 2.0}	8	18.45	119.74	173	297	0.00	2.02	15.89
mp-517	{'Ta': 3.0, 'Si': 6.0}	9	8.94	132.10	142	185	0.00	1.99	15.89
mp-11192	{'Ta': 3.0, 'Si': 6.0}	9	8.94	132.12	142	184	0.00	1.99	15.89
mp-1018804	{'Mn': 2.0, 'S': 4.0}	6	4.67	84.70	107	115	0.00	2.14	15.87
mp-755021	{'Re': 2.0, 'O': 6.0}	8	7.15	108.76	124	238	0.00	1.97	15.85
mp-2823	{'Nd': 1.0, 'P': 1.0}	2	5.68	51.21	51	77	0.00	1.88	15.84
mp-1553	{'Ho': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	9.45	80.53	71	135	0.00	1.18	15.82
mp-570791	{'Si': 19.0, 'C': 19.0}	38	3.17	398.86	187	214	2.07	1.85	15.81
mp-7790	{'Ti': 4.0, 'N': 2.0}	6	4.76	76.52	104	179	0.00	2.08	15.79
mvc-13303	{'V': 2.0, 'N': 2.0}	4	6.15	35.07	100	308	0.00	2.06	15.77
mp-864735	{'Mn': 6.0, 'Ir': 2.0}	8	12.63	93.92	169	359	0.00	2.11	15.76
mp-13126	{'Zr': 2.0, 'N': 2.0}	4	5.64	61.97	76	200	0.00	1.88	15.70
mp-1113	{'B': 2.0, 'W': 4.0}	6	16.76	75.00	152	330	0.00	2.02	15.70
mp-2614	{'Hf': 1.0, 'Al': 3.0}	4	6.20	69.53	83	107	0.00	1.98	15.68
mp-10030	{'Ru': 1.0, 'C': 1.0}	2	9.38	20.02	89	338	0.00	2.19	15.67
mp-510401	{'Gd': 1.0, 'P': 1.0}	2	6.68	46.79	55	80	0.00	1.89	15.63
mp-2700	{'Ca': 1.0, 'Si': 2.0}	3	2.36	67.66	47	63	0.00	1.89	15.61
mp-2662	{'Mn': 4.0, 'P': 4.0}	8	5.96	95.77	130	186	0.00	2.09	15.56
mp-988	{'Si': 6.0, 'N': 8.0}	14	3.13	148.65	120	234	4.26	1.90	15.49
mp-12108	{'V': 1.0, 'Pt': 2.0}	3	16.54	44.29	114	246	0.00	2.13	15.48
mp-998981	{'Ti': 1.0, 'Al': 3.0}	4	3.40	62.85	69	106	0.00	1.99	15.45

mp-2126	{'Hf': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	20.07	62.48	149	276	0.00	2.26	15.42
mp-714885	{'V': 2.0, 'O': 2.0}	4	5.25	42.38	92	163	0.96	2.09	15.31
mp-1367	{'Mg': 2.0, 'Si': 1.0}	3	1.98	64.47	45	53	0.29	1.91	15.26
mp-774	{'Ca': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	6.75	82.08	65	125	0.00	1.26	15.26
mp-2664	{'Ti': 1.0, 'O': 1.0}	2	5.38	19.73	65	224	0.00	2.02	15.24
mp-1001789	{'Ir': 1.0, 'C': 1.0}	2	13.62	24.89	86	284	0.00	2.05	15.22
mp-24650	{'Y': 1.0, 'H': 2.0}	3	4.26	35.42	58	69	0.00	1.72	15.20
mp-1865	{'U': 1.0, 'N': 1.0}	2	14.47	28.92	79	218	0.00	1.94	15.18
mp-22787	{'Fe': 4.0, 'Si': 2.0}	6	7.17	64.72	119	237	0.00	2.07	15.15
mp-1474	{'Re': 3.0, 'P': 4.0}	7	10.95	103.49	137	187	0.00	2.05	15.14
mp-1152	{'Ti': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	10.28	57.59	129	230	0.00	2.37	15.13
mp-20425	{'Np': 1.0, 'Si': 3.0}	4	8.31	64.17	82	106	0.00	1.82	15.12
mp-1005	{'Fe': 4.0, 'P': 4.0}	8	6.37	90.50	133	212	0.00	2.11	15.12
mp-214	{'Zr': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	9.03	35.36	81	183	0.00	2.28	15.12
mp-2052	{'Sc': 1.0, 'As': 1.0}	2	4.81	41.36	53	84	0.00	1.99	15.11
mp-1018081	{'Cr': 1.0, 'Fe': 3.0}	4	8.05	45.27	94	117	0.00	1.93	15.01
mp-9972	{'Y': 2.0, 'Si': 2.0}	4	4.46	87.04	65	89	0.00	1.89	15.01
mp-758933	{'B': 48.0, 'O': 6.0}	54	2.53	403.05	180	205	2.54	1.60	15.00
mp-20340	{'Eu': 1.0, 'N': 1.0}	2	8.41	32.75	67	111	0.00	2.00	14.96
mp-978496	{'Si': 3.0, 'B': 12.0}	15	2.55	139.19	100	138	0.00	1.66	14.95
mp-24719	{'Ni': 1.0, 'H': 1.0}	2	7.75	12.79	68	199	0.00	1.77	14.90
mp-1409	{'Ti': 4.0, 'Ni': 12.0}	16	7.96	186.91	97	192	0.00	1.10	14.89
mp-999204	{'Sc': 1.0, 'Al': 3.0}	4	2.92	71.68	64	94	0.00	2.03	14.89
mp-11526	{'Tm': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	9.62	79.79	71	141	0.00	1.23	14.89
mp-365	{'Mg': 4.0, 'B': 16.0}	20	2.50	179.15	113	159	0.37	1.65	14.88
mp-417	{'Mn': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	9.28	28.24	81	182	0.00	2.21	14.86
mp-1672	{'Ca': 1.0, 'S': 1.0}	2	2.57	46.70	39	57	2.56	1.91	14.82
mp-2596	{'Np': 1.0, 'N': 1.0}	2	14.45	28.85	80	145	0.00	1.97	14.82
mp-11517	{'Nb': 1.0, 'Ru': 3.0}	4	11.01	59.74	128	271	0.00	2.36	14.81
mp-582034	{'Si': 21.0, 'C': 21.0}	42	3.17	440.78	187	213	1.71	1.85	14.78
mp-11460	{'Hf': 1.0, 'Tc': 1.0}	2	13.18	34.84	76	192	0.00	2.01	14.77
mp-2154	{'Ce': 1.0, 'P': 1.0}	2	5.82	48.78	51	76	0.00	1.92	14.76
mp-2118	{'Rh': 4.0, 'N': 12.0}	16	6.67	144.26	185	270	0.00	2.06	14.76
mp-12875	{'Re': 2.0, 'O': 4.0}	6	10.89	66.53	130	317	0.00	2.03	14.72
mp-1179	{'Dy': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	9.36	80.89	70	147	0.00	1.24	14.69
mp-867281	{'Tc': 6.0, 'Pt': 2.0}	8	13.81	117.60	175	283	0.00	2.25	14.63
mp-22320	{'Ga': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	10.19	27.82	88	201	0.00	2.29	14.61
mp-865960	{'Co': 2.0, 'Re': 6.0}	8	18.47	111.05	161	338	0.00	1.98	14.60
mp-933	{'Y': 1.0, 'As': 1.0}	2	5.47	49.70	51	75	0.00	1.97	14.59
mp-487	{'Mn': 2.0, 'P': 8.0}	10	4.06	146.39	114	138	0.45	2.07	14.56
mp-570155	{'Pt': 2.0, 'N': 4.0}	6	12.61	58.74	166	273	1.15	2.28	14.54
mp-10054	{'Zr': 1.0, 'As': 1.0}	2	6.70	41.17	59	116	0.00	2.04	14.49
mp-8939	{'Si': 6.0, 'W': 3.0}	9	9.74	122.82	147	221	0.16	2.07	14.47
mp-601	{'Pr': 1.0, 'P': 1.0}	2	5.42	52.63	49	74	0.00	1.94	14.47
mp-568328	{'Fe': 2.0, 'P': 8.0}	10	4.21	141.95	118	139	0.90	2.10	14.46
mp-1096	{'Ce': 1.0, 'S': 1.0}	2	6.23	45.88	52	87	0.00	1.92	14.37
mp-11278	{'Ta': 4.0, 'Be': 2.0}	6	13.76	89.52	117	187	0.00	1.87	14.35
mp-475	{'Sn': 1.0, 'P': 1.0}	2	5.68	43.72	59	59	0.00	2.12	14.33
mp-569128	{'Si': 8.0, 'B': 24.0}	32	2.45	328.15	129	156	1.49	1.63	14.30
mp-999376	{'Nb': 2.0, 'Pt': 2.0}	4	14.40	66.44	115	223	0.00	2.14	14.29
mp-1910	{'Ce': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	8.79	81.90	65	151	0.00	1.20	14.27

mp-11809	{'Ti': 2.0, 'Al': 4.0}	6	3.53	95.69	81	108	0.00	2.02	14.27
mp-1001834	{'Hf': 1.0, 'N': 1.0}	2	14.31	22.33	77	172	0.00	1.88	14.24
mp-429	{'Zn': 1.0, 'Ni': 1.0}	2	8.56	24.09	63	146	0.00	1.86	14.24
mp-1009750	{'Sc': 1.0, 'N': 1.0}	2	3.34	29.33	45	141	2.52	1.90	14.19
mp-530074	{'B': 56.0, 'C': 14.0}	70	2.43	529.40	186	219	0.00	1.56	14.18
mp-11514	{'Nb': 1.0, 'Pt': 2.0}	3	16.50	48.62	108	244	0.00	2.18	14.13
mp-567397	{'W': 6.0, 'C': 3.0}	9	16.54	114.38	166	336	0.00	2.00	14.12
mp-12979	{'Sn': 1.0, 'O': 2.0}	3	7.34	34.11	109	260	0.45	2.48	14.11
mp-11231	{'Y': 1.0, 'Al': 3.0}	4	3.64	77.43	63	76	0.00	1.97	14.09
mp-567164	{'B': 2.0, 'Rh': 2.0}	4	9.12	41.43	101	275	0.00	2.04	14.07
mp-2640	{'Tb': 1.0, 'As': 1.0}	2	7.74	50.15	52	77	0.00	1.86	14.07
mp-1101	{'Tm': 1.0, 'As': 1.0}	2	8.52	47.55	55	80	0.00	1.88	14.07
mp-1963	{'Nb': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	10.11	32.16	79	220	0.00	2.23	14.06
mp-2472	{'Sr': 1.0, 'O': 1.0}	2	4.88	35.28	56	87	3.45	2.09	14.05
mp-10910	{'Al': 4.0, 'Ru': 2.0}	6	6.10	84.43	103	167	0.10	2.09	14.02
mp-977573	{'Hf': 1.0, 'H': 3.0}	4	10.27	29.35	95	132	0.00	1.75	14.02
mp-16521	{'Al': 3.0, 'Os': 2.0}	5	10.98	69.77	114	204	0.00	2.07	14.00
mp-22784	{'In': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	9.31	51.88	62	150	0.00	1.37	14.00
mp-7576	{'Cr': 4.0, 'Si': 4.0}	8	5.47	97.31	116	187	0.00	2.08	13.96
mp-570112	{'Cr': 6.0, 'C': 4.0}	10	6.66	89.80	147	309	0.00	2.11	13.90
mp-1138	{'Li': 1.0, 'F': 1.0}	2	2.53	17.02	51	70	8.72	2.04	13.86
mp-30741	{'Pa': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	19.62	68.35	128	251	0.00	2.19	13.84
mp-862779	{'Tc': 6.0, 'Os': 2.0}	8	13.85	116.07	176	326	0.00	2.32	13.83
mp-11573	{'Ti': 1.0, 'Tc': 1.0}	2	8.08	29.99	72	207	0.00	2.20	13.81
mp-2490	{'Ga': 1.0, 'P': 1.0}	2	4.01	41.74	52	76	1.68	2.15	13.75
mp-2811	{'Mo': 8.0, 'N': 8.0}	16	8.91	163.84	196	327	0.00	2.12	13.75
mp-2229	{'Zn': 1.0, 'O': 1.0}	2	6.62	20.42	65	172	1.05	2.02	13.74
mp-2199	{'Fe': 3.0, 'Si': 1.0}	4	7.39	43.96	93	212	0.00	2.06	13.74
mp-1009836	{'Zr': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.52	23.24	65	249	0.00	2.01	13.72
mp-1597	{'U': 1.0, 'O': 2.0}	3	11.26	39.81	89	200	0.00	2.04	13.70
mp-776532	{'Hf': 2.0, 'O': 4.0}	6	9.18	76.14	106	217	3.91	1.93	13.68
mp-2458	{'Tb': 1.0, 'O': 2.0}	3	7.74	40.96	80	142	0.00	2.07	13.67
mp-775909	{'Zr': 2.0, 'O': 4.0}	6	5.12	79.94	91	194	3.44	2.01	13.66
mp-1895	{'Ta': 1.0, 'O': 1.0}	2	14.29	22.89	80	269	0.00	2.00	13.62
mp-1925	{'Zr': 1.0, 'S': 1.0}	2	5.67	36.11	51	131	0.00	1.93	13.61
mp-1688	{'Er': 1.0, 'As': 1.0}	2	8.35	48.14	54	79	0.00	1.90	13.60
mp-1007660	{'Ir': 2.0, 'N': 2.0}	4	15.04	45.53	135	281	0.00	2.28	13.59
mp-7092	{'Ti': 4.0, 'Si': 4.0}	8	4.22	119.43	99	146	0.00	2.07	13.59
mp-2831	{'Fe': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	9.67	27.86	76	162	0.00	2.17	13.58
mp-415	{'Ir': 4.0, 'N': 8.0}	12	12.99	112.61	206	339	0.38	2.19	13.53
mp-7048	{'Al': 4.0, 'O': 6.0}	10	3.51	96.47	101	186	4.61	1.91	13.50
mp-865496	{'V': 2.0, 'Ir': 6.0}	8	18.49	112.75	186	320	0.00	2.27	13.50
mp-1021489	{'Ir': 1.0, 'O': 3.0}	4	7.32	54.48	97	178	0.00	2.21	13.49
mp-1001602	{'B': 12.0, 'W': 1.0}	13	5.27	98.72	115	239	0.00	1.65	13.49
mp-972326	{'Tc': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	18.54	61.21	133	265	0.00	2.26	13.47
mp-295	{'Ho': 1.0, 'As': 1.0}	2	8.17	48.77	53	74	0.00	1.90	13.43
mp-2370	{'Pr': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	8.51	84.76	62	151	0.00	1.22	13.42
mp-976872	{'Na': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	6.51	50.79	49	103	0.00	1.23	13.41
mp-1044	{'U': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	20.34	66.50	122	269	0.00	2.12	13.39
mp-30745	{'Ir': 6.0, 'W': 2.0}	8	21.33	118.41	193	351	0.00	2.28	13.36
mp-974326	{'Os': 2.0, 'Ru': 6.0}	8	14.63	112.04	204	334	0.00	2.53	13.36

mp-20994	{'Ta': 2.0, 'O': 4.0}	6	9.81	72.11	117	246	0.00	2.05	13.35
mp-1025192	{'Ta': 4.0, 'C': 3.0}	7	14.36	87.84	130	296	0.00	1.93	13.35
mp-931	{'Th': 1.0, 'P': 1.0}	2	8.69	50.24	54	114	0.00	1.93	13.33
mp-1541	{'Be': 1.0, 'Se': 1.0}	2	4.19	34.82	43	49	2.90	1.81	13.30
mp-9938	{'Hf': 4.0, 'Si': 2.0}	6	11.37	112.47	100	141	0.00	1.88	13.26
mp-1129	{'Sc': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	11.66	33.78	75	166	0.00	2.15	13.25
mp-974370	{'Pt': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	14.28	58.60	124	273	0.00	2.30	13.22
mp-2008	{'Fe': 2.0, 'As': 4.0}	6	7.42	92.01	110	134	0.29	2.16	13.22
mp-11690	{'Tc': 4.0, 'P': 6.0}	10	6.61	145.15	129	179	0.00	2.11	13.17
mp-977434	{'Nb': 3.0, 'Ru': 1.0}	4	9.27	68.05	94	201	0.00	2.15	13.17
mp-2384	{'La': 1.0, 'P': 1.0}	2	5.09	55.39	44	82	0.00	1.93	13.15
mp-2627	{'Dy': 1.0, 'As': 1.0}	2	7.97	49.44	52	76	0.00	1.91	13.14
mp-2212	{'Sc': 1.0, 'Co': 1.0}	2	5.68	30.36	59	121	0.00	2.12	13.14
mp-1009129	{'Mg': 1.0, 'O': 1.0}	2	3.34	20.03	48	139	3.02	1.95	13.11
mp-866083	{'Zr': 6.0, 'N': 4.0}	10	6.81	147.04	116	196	0.00	1.96	13.09
mp-351	{'Si': 4.0, 'Ni': 4.0}	8	5.98	96.37	82	164	0.00	1.59	13.08
mp-1918	{'Fe': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	9.58	27.51	79	197	0.00	2.27	13.07
mp-1938	{'Al': 8.0, 'O': 12.0}	20	3.95	171.32	145	231	5.31	1.92	13.06
mp-11482	{'Mo': 2.0, 'Ir': 6.0}	8	18.95	117.85	188	337	0.00	2.32	13.05
mp-229	{'Zr': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	10.59	62.73	113	211	0.00	2.34	13.01
mp-11329	{'P': 4.0, 'W': 2.0}	6	9.15	89.21	113	189	0.00	2.12	13.00
mp-867356	{'Tc': 2.0, 'Ru': 6.0}	8	11.85	112.42	184	314	0.00	2.51	12.99
mp-1069	{'Hf': 2.0, 'Si': 4.0}	6	7.92	98.35	94	132	0.00	1.94	12.99
mp-867357	{'Tc': 6.0, 'Ni': 2.0}	8	10.76	108.82	150	284	0.00	2.25	12.97
mp-378	{'Er': 2.0, 'Si': 2.0}	4	7.71	84.14	67	95	0.00	1.80	12.96
mp-569250	{'V': 2.0, 'Ir': 2.0}	4	14.53	55.59	116	273	0.00	2.19	12.95
mp-977283	{'Mg': 1.0, 'Re': 3.0}	4	16.02	60.42	100	286	0.00	1.96	12.92
mp-1534	{'Y': 1.0, 'S': 1.0}	2	4.72	42.54	44	127	0.00	1.91	12.91
mp-1539	{'Zr': 1.0, 'Te': 1.0}	2	7.46	48.74	56	93	0.00	2.07	12.91
mp-601820	{'Fe': 3.0, 'Co': 1.0}	4	8.14	46.22	96	187	0.00	2.13	12.90
mp-1567	{'Th': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	10.39	83.97	64	184	0.00	1.21	12.89
mp-12899	{'Ho': 2.0, 'Si': 2.0}	4	7.51	85.31	66	92	0.00	1.81	12.86
mp-470	{'Ge': 2.0, 'O': 4.0}	6	5.94	58.48	123	206	1.91	2.34	12.80
mp-865733	{'Co': 2.0, 'Tc': 6.0}	8	10.87	107.78	144	288	0.00	2.20	12.79
mp-226	{'Fe': 4.0, 'S': 8.0}	12	5.05	157.80	135	146	0.46	2.18	12.79
mp-507	{'Si': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	7.35	65.70	58	203	0.00	1.17	12.78
mp-8352	{'Si': 2.0, 'O': 4.0}	6	1.92	103.83	54	134	5.47	1.88	12.76
mp-1278	{'Zr': 4.0, 'Si': 2.0}	6	5.97	117.08	87	126	0.00	2.04	12.76
mp-866121	{'V': 3.0, 'Os': 1.0}	4	10.54	54.03	107	246	0.00	2.24	12.76
mp-2486	{'U': 1.0, 'C': 2.0}	3	11.78	36.94	71	155	0.00	1.72	12.76
mp-16514	{'Al': 3.0, 'Ni': 5.0}	8	6.72	92.56	75	167	0.00	1.41	12.75
mp-1018067	{'Cr': 1.0, 'Fe': 3.0}	4	7.98	45.67	88	184	0.00	2.02	12.75
mp-1275	{'Si': 2.0, 'Mo': 6.0}	8	8.81	119.05	127	252	0.00	2.15	12.73
mp-1018124	{'Ti': 2.0, 'Rh': 1.0}	3	7.09	46.53	82	157	0.00	2.27	12.72
mp-1738	{'Sm': 1.0, 'As': 1.0}	2	7.06	53.02	47	71	0.00	1.88	12.71
mp-1395	{'V': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	9.21	27.40	76	252	0.00	2.27	12.71
mp-20304	{'Rh': 2.0, 'N': 4.0}	6	7.63	56.98	115	209	0.00	2.11	12.70
mp-1936	{'Ta': 2.0, 'As': 2.0}	4	12.03	70.63	97	176	0.00	2.11	12.66
mp-813	{'Sc': 2.0, 'Al': 4.0}	6	3.01	109.15	69	88	0.00	2.02	12.62
mp-891	{'Ta': 2.0, 'Ni': 6.0}	8	12.03	98.54	82	218	0.00	1.29	12.61
mp-980094	{'Ti': 2.0, 'Pd': 2.0}	4	8.11	63.17	92	154	0.00	2.19	12.61

mp-1018140	{'Mg': 1.0, 'Ni': 1.0}	2	4.90	28.15	48	149	0.00	1.92	12.55
mp-2783	{'Ta': 4.0, 'Si': 2.0}	6	13.27	97.57	112	215	0.00	1.99	12.52
mp-2602	{'Nd': 1.0, 'As': 1.0}	2	6.58	55.27	45	68	0.00	1.88	12.52
mp-980	{'U': 1.0, 'Si': 2.0}	3	9.06	53.92	64	129	0.00	1.84	12.51
mp-570985	{'Si': 27.0, 'C': 27.0}	54	3.17	566.75	187	213	1.90	1.85	12.50
mp-1009130	{'Mn': 1.0, 'N': 1.0}	2	5.92	19.33	58	239	0.09	1.99	12.50
mp-1451	{'Nb': 2.0, 'Ni': 6.0}	8	8.95	99.81	77	211	0.00	1.36	12.49
mp-1552	{'Mo': 8.0, 'C': 4.0}	12	8.94	151.42	150	294	0.00	2.09	12.48
mp-1008349	{'Co': 3.0, 'Ni': 1.0}	4	9.01	43.39	105	205	0.00	2.23	12.48
mp-862820	{'Pa': 1.0, 'Si': 3.0}	4	7.52	69.60	69	124	0.00	1.84	12.47
mp-331	{'Sc': 1.0, 'Al': 1.0}	2	3.10	38.54	41	78	0.00	2.01	12.44
mp-1014265	{'Zr': 4.0, 'N': 2.0}	6	6.64	98.19	88	173	0.00	1.99	12.41
mp-1027	{'Hf': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	13.10	61.74	116	219	0.00	2.31	12.40
mp-11233	{'Zr': 2.0, 'Al': 2.0}	4	4.96	79.12	68	108	0.00	2.07	12.40
mp-7586	{'Ni': 6.0, 'C': 2.0}	8	7.99	78.21	66	195	0.00	1.12	12.38
mp-2620	{'Dy': 2.0, 'Si': 2.0}	4	7.31	86.60	64	92	0.00	1.82	12.37
mp-669	{'Th': 1.0, 'Al': 2.0}	3	6.75	70.37	58	87	0.00	1.93	12.36
mp-1019097	{'Si': 2.0, 'C': 4.0}	6	2.48	69.83	59	161	0.00	1.78	12.35
mp-999516	{'Mn': 2.0, 'P': 2.0}	4	5.50	51.85	80	122	0.00	2.13	12.33
mp-2317	{'La': 1.0, 'Ni': 5.0}	6	8.39	85.61	59	135	0.00	1.24	12.31
mp-2059	{'Nb': 2.0, 'As': 2.0}	4	7.81	71.41	88	162	0.00	2.21	12.31
mp-1235	{'Ti': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	13.17	30.27	81	228	0.00	2.25	12.29
mp-893	{'Zr': 4.0, 'Si': 4.0}	8	5.56	142.46	93	141	0.00	2.00	12.27
mp-6988	{'Fe': 1.0, 'N': 1.0}	2	6.13	18.93	60	267	0.00	2.04	12.26
mp-10759	{'Ge': 1.0, 'Se': 1.0}	2	5.54	45.47	45	58	0.44	1.91	12.25
mp-2134	{'Er': 1.0, 'Al': 3.0}	4	5.43	75.87	64	79	0.00	1.93	12.24
mp-1013524	{'Ca': 3.0, 'N': 2.0}	5	2.53	97.41	55	74	0.50	1.95	12.22
mp-866134	{'V': 1.0, 'Fe': 3.0}	4	7.74	46.87	90	193	0.00	2.12	12.22
mp-739	{'Ti': 4.0, 'P': 4.0}	8	4.22	124.10	91	139	0.00	2.06	12.19
mp-11358	{'Ta': 1.0, 'Co': 3.0}	4	12.34	48.15	115	147	0.00	2.25	12.16
mp-15694	{'Pa': 1.0, 'As': 1.0}	2	10.44	48.69	54	108	0.00	1.92	12.15
mp-12107	{'Ti': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.03	61.72	113	237	0.00	2.17	12.12
mp-259	{'Al': 2.0, 'Mo': 6.0}	8	8.47	123.43	121	225	0.00	2.16	12.11
mp-1018054	{'Hf': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	19.33	65.62	114	231	0.00	2.14	12.10
mp-7302	{'Cr': 2.0, 'P': 8.0}	10	3.90	149.92	100	124	0.00	2.08	12.10
mp-20194	{'Ce': 1.0, 'O': 2.0}	3	6.99	40.86	72	177	1.88	2.10	12.09
mp-2533	{'Nb': 2.0, 'O': 4.0}	6	5.65	73.45	96	235	0.00	2.14	12.08
mp-978552	{'Si': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	10.19	54.87	105	237	0.00	2.29	12.06
mp-1025156	{'Np': 1.0, 'B': 6.0}	7	7.32	68.47	81	150	0.00	1.57	12.04
mp-861610	{'Tc': 6.0, 'Pd': 2.0}	8	11.35	117.11	146	253	0.00	2.28	12.04
mp-1009694	{'Re': 1.0, 'N': 1.0}	2	16.07	20.69	77	331	0.00	1.98	12.03
mp-12594	{'Ti': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	13.11	30.42	78	218	0.00	2.22	12.01
mp-1002109	{'V': 1.0, 'Co': 1.0}	2	7.52	24.27	71	207	0.00	2.29	11.98
mp-11521	{'Sc': 1.0, 'Ni': 1.0}	2	5.42	31.76	46	110	0.00	1.88	11.97
mp-862798	{'Pt': 3.0, 'W': 1.0}	4	20.50	62.30	118	284	0.00	2.16	11.96
mp-867262	{'Sc': 1.0, 'Tc': 3.0}	4	9.06	62.13	91	214	0.00	2.18	11.95
mp-1797	{'Mn': 1.0, 'Ni': 1.0}	2	7.63	24.73	44	150	0.00	1.57	11.94
mp-9830	{'Nb': 2.0, 'P': 2.0}	4	6.35	64.81	77	146	0.00	2.12	11.92
mp-10760	{'Mg': 1.0, 'Se': 1.0}	2	4.10	41.84	41	59	1.98	1.93	11.91
mp-510374	{'Gd': 1.0, 'As': 1.0}	2	7.52	51.27	47	38	0.00	1.87	11.90
mp-980203	{'Ti': 1.0, 'Os': 3.0}	4	17.48	58.76	131	308	0.00	2.38	11.90

mp-27919	{'Ti': 8.0, 'C': 5.0}	13	4.54	161.98	115	170	0.00	2.01	11.88
mp-881	{'Np': 1.0, 'Sn': 3.0}	4	9.72	101.37	82	68	0.00	2.11	11.87
mp-973149	{'Mn': 3.0, 'Al': 1.0}	4	6.82	46.69	78	187	0.00	2.01	11.84
mp-999473	{'Zn': 1.0, 'N': 1.0}	2	6.57	20.07	56	164	0.00	1.95	11.78
mp-279	{'Li': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	12.14	27.24	65	144	0.00	1.96	11.76
mp-2034	{'W': 8.0, 'C': 4.0}	12	16.57	152.23	167	334	0.00	2.00	11.73
mp-2033	{'Ni': 6.0, 'N': 2.0}	8	8.02	78.72	73	197	0.00	1.32	11.73
mp-569775	{'Zr': 1.0, 'Al': 3.0}	4	4.13	69.27	64	100	0.00	2.09	11.73
mp-249	{'Hf': 2.0, 'Al': 2.0}	4	8.96	76.13	74	117	0.00	1.95	11.72
mp-8780	{'Cr': 6.0, 'N': 3.0}	9	6.72	87.42	140	285	0.00	2.30	11.69
mp-1007853	{'Fe': 3.0, 'Ni': 1.0}	4	8.09	46.43	75	194	0.00	1.88	11.68
mp-1172	{'Mg': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	6.91	30.56	58	115	0.00	2.11	11.68
mp-2705	{'V': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.57	60.14	111	241	0.00	2.16	11.67
mp-567589	{'Dy': 1.0, 'Al': 3.0}	4	5.25	77.05	62	77	0.00	1.95	11.67
mp-2179	{'Ti': 1.0, 'Re': 1.0}	2	12.81	30.33	71	232	0.00	2.12	11.65
mp-1001612	{'Lu': 2.0, 'Si': 2.0}	4	8.34	80.88	68	95	0.00	1.88	11.64
mp-8880	{'Al': 2.0, 'P': 2.0}	4	2.31	83.44	46	83	2.02	1.96	11.64
mp-1780	{'Sc': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	7.24	33.89	61	138	0.00	2.21	11.63
mp-855	{'Mg': 2.0, 'Be': 26.0}	28	1.83	256.49	99	100	0.00	1.63	11.62
mp-976943	{'Na': 1.0, 'Re': 3.0}	4	15.82	61.06	94	286	0.00	1.98	11.61
mp-457	{'Ce': 2.0, 'Be': 26.0}	28	3.16	270.47	118	111	0.00	1.63	11.61
mp-999542	{'Mn': 1.0, 'Fe': 3.0}	4	8.11	45.53	85	170	0.00	2.05	11.60
mp-1006880	{'Bi': 1.0, 'B': 1.0}	2	8.57	42.56	59	72	0.36	2.13	11.58
mp-372	{'V': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.47	60.45	110	241	0.00	2.16	11.55
mp-10622	{'Pr': 1.0, 'As': 1.0}	2	6.33	56.58	44	67	0.00	1.95	11.53
mp-1008282	{'Cr': 3.0, 'Fe': 1.0}	4	7.58	46.43	83	38	0.00	2.00	11.50
mp-865027	{'Mn': 3.0, 'Ge': 1.0}	4	8.24	47.87	85	190	0.00	2.08	11.48
mp-978534	{'Si': 2.0, 'Ge': 2.0}	4	3.82	87.53	56	74	0.41	2.02	11.47
mp-1871	{'Fe': 4.0, 'C': 2.0}	6	7.21	56.98	101	221	0.00	2.06	11.45
mp-603	{'Be': 4.0, 'Ag': 2.0}	6	6.32	66.15	84	129	0.00	1.89	11.42
mp-1039141	{'Mg': 1.0, 'Al': 1.0}	2	2.21	38.47	33	58	0.00	1.93	11.40
mp-252	{'Be': 1.0, 'Te': 1.0}	2	4.99	45.51	40	55	2.21	1.86	11.40
mp-6938	{'Zn': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	10.04	27.83	72	173	0.00	2.25	11.39
mp-2563	{'Ce': 1.0, 'Se': 1.0}	2	6.99	52.03	45	55	0.00	1.91	11.38
mp-755875	{'Ti': 3.0, 'O': 4.0}	7	4.71	73.15	89	178	0.00	2.01	11.38
mp-823	{'Ti': 1.0, 'Co': 1.0}	2	6.71	26.41	61	163	0.00	2.19	11.35
mp-1017531	{'V': 2.0, 'Pt': 2.0}	4	14.23	57.41	99	238	0.00	2.11	11.34
mp-1067	{'Li': 2.0, 'Al': 2.0}	4	1.75	64.21	40	50	0.00	1.81	11.33
mp-1203	{'Ti': 5.0, 'O': 5.0}	10	4.87	108.80	106	195	0.00	2.04	11.31
mp-976060	{'Li': 3.0, 'C': 1.0}	4	1.48	36.80	42	67	0.00	1.79	11.31
mp-30738	{'Li': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	17.37	55.80	112	243	0.00	2.19	11.29
mp-862620	{'Ir': 2.0, 'Ru': 6.0}	8	14.63	112.45	180	314	0.00	2.52	11.29
mp-24722	{'H': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	10.32	16.72	67	217	0.00	1.98	11.29
mp-865382	{'V': 3.0, 'Ru': 1.0}	4	7.86	53.65	92	225	0.00	2.28	11.28
mp-1214	{'V': 2.0, 'S': 2.0}	4	4.95	55.66	72	118	0.00	2.14	11.27
mp-22488	{'Co': 4.0, 'C': 2.0}	6	7.85	54.92	110	257	0.00	2.15	11.27
mp-1877	{'Ho': 1.0, 'Al': 3.0}	4	5.33	76.56	60	77	0.00	1.93	11.24
mp-1723	{'U': 1.0, 'Al': 3.0}	4	6.85	77.28	64	89	0.00	1.91	11.23
mp-20685	{'Cr': 6.0, 'Ge': 2.0}	8	7.86	96.60	128	211	0.00	2.27	11.21
mp-7228	{'Re': 4.0, 'O': 8.0}	12	11.24	128.95	151	277	0.00	2.03	11.20
mp-11291	{'Ce': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	7.35	57.08	45	49	0.00	1.93	11.17

mp-982048	{'Ge': 2.0, 'O': 3.0}	5	5.97	53.76	102	162	0.75	2.34	11.17
mp-867816	{'Ta': 1.0, 'Ru': 3.0}	4	13.48	59.66	117	265	0.00	2.41	11.16
mp-2172	{'Al': 1.0, 'As': 1.0}	2	3.59	47.13	39	70	1.69	2.03	11.16
mp-10908	{'Al': 1.0, 'Re': 1.0}	2	12.32	28.73	64	220	0.00	2.02	11.15
mp-557762	{'Ti': 3.0, 'S': 3.0}	6	4.35	91.47	77	128	0.00	2.08	11.14
mp-755690	{'Nb': 2.0, 'O': 4.0}	6	5.60	74.13	89	181	0.00	2.11	11.13
mp-567925	{'Mo': 4.0, 'C': 4.0}	8	8.46	84.79	114	318	0.00	2.04	11.12
mp-2379	{'Co': 1.0, 'Si': 2.0}	3	4.96	38.50	64	177	0.00	2.16	11.11
mp-603694	{'Si': 12.0, 'N': 16.0}	28	3.21	290.12	133	221	0.00	1.90	11.10
mp-20120	{'Fe': 1.0, 'Se': 1.0}	2	7.94	28.21	60	107	0.00	2.12	11.10
mp-11508	{'Mo': 2.0, 'P': 8.0}	10	4.45	164.24	98	129	0.00	2.11	11.09
mp-10890	{'Li': 1.0, 'Al': 3.0}	4	2.24	65.24	44	64	0.00	1.86	11.08
mp-2732	{'P': 1.0, 'Rh': 2.0}	3	9.13	43.05	84	235	0.00	2.30	11.07
mp-862655	{'Ru': 6.0, 'W': 2.0}	8	14.00	115.57	162	309	0.00	2.41	11.06
mp-2733	{'Al': 8.0, 'Mo': 3.0}	11	5.00	167.15	104	141	0.00	2.05	11.05
mp-755175	{'Al': 8.0, 'O': 12.0}	20	3.66	184.82	125	189	5.49	1.93	11.05
mp-569364	{'Be': 44.0, 'Re': 2.0}	46	3.36	380.02	152	137	0.00	1.65	11.04
mp-2748	{'Ce': 1.0, 'As': 1.0}	2	6.69	53.37	43	61	0.00	1.91	11.03
mp-7577	{'Co': 4.0, 'Si': 4.0}	8	6.63	87.13	116	210	0.00	2.19	11.03
mp-30444	{'Be': 44.0, 'W': 2.0}	46	3.28	386.63	150	133	0.00	1.64	11.02
mp-766	{'As': 4.0, 'Ru': 2.0}	6	8.05	103.50	105	149	0.56	2.28	11.01
mp-1670	{'Mn': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	13.67	30.37	72	168	0.00	2.16	10.99
mp-395	{'Zr': 2.0, 'Al': 6.0}	8	4.09	139.93	83	103	0.00	2.08	10.98
mp-408	{'Mg': 2.0, 'Ge': 1.0}	3	3.04	66.32	42	50	0.25	1.94	10.98
mp-1921	{'Th': 1.0, 'Te': 1.0}	2	10.45	57.14	51	82	0.00	1.98	10.97
mp-12763	{'Tb': 1.0, 'B': 6.0}	7	5.39	68.91	67	175	0.00	1.54	10.97
mp-973342	{'Sb': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	11.43	62.55	102	205	0.00	2.32	10.95
mp-1018057	{'Hf': 2.0, 'Be': 2.0}	4	9.95	62.61	65	111	0.00	1.71	10.94
mp-12593	{'Sc': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	16.76	61.58	111	243	0.00	2.26	10.93
mp-973	{'U': 2.0, 'N': 3.0}	5	12.63	68.14	94	202	0.00	1.96	10.93
mp-1014230	{'Ti': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	6.04	31.16	56	115	0.00	2.21	10.90
mp-14285	{'Co': 4.0, 'P': 8.0}	12	5.11	157.01	122	163	0.54	2.19	10.88
mp-768	{'Tm': 1.0, 'Al': 3.0}	4	5.51	75.29	59	77	0.00	1.92	10.87
mp-9939	{'Hf': 4.0, 'Ge': 2.0}	6	12.21	116.81	93	133	0.00	1.95	10.85
mp-1009829	{'Be': 2.0, 'Si': 1.0}	3	2.08	36.80	35	105	0.00	1.71	10.75
mp-1001023	{'Be': 2.0, 'C': 4.0}	6	1.88	58.40	45	83	1.79	1.58	10.73
mp-1025126	{'Mg': 2.0, 'Si': 4.0}	6	2.62	102.03	57	24	0.00	1.89	10.69
mp-24669	{'Cr': 2.0, 'H': 2.0}	4	5.94	29.65	76	185	0.00	1.99	10.69
mp-1335	{'V': 1.0, 'Fe': 1.0}	2	7.39	24.00	61	196	0.00	2.18	10.68
mp-20937	{'Cr': 12.0, 'C': 8.0}	20	6.80	175.96	169	320	0.00	2.10	10.68
mp-1959	{'Pu': 1.0, 'O': 2.0}	3	11.74	39.03	76	191	0.00	2.03	10.68
mp-975834	{'Mo': 2.0, 'Ru': 6.0}	8	11.51	115.19	154	286	0.00	2.47	10.62
mp-11345	{'Zr': 4.0, 'P': 4.0}	8	5.40	150.39	82	134	0.00	1.99	10.60
mp-19443	{'W': 2.0, 'O': 6.0}	8	6.66	115.67	101	197	1.15	2.12	10.59
mp-708	{'La': 1.0, 'As': 1.0}	2	5.97	59.48	40	65	0.04	1.94	10.57
mp-570409	{'Pr': 1.0, 'Al': 3.0}	4	4.38	84.05	54	67	0.00	1.96	10.56
mp-1001835	{'Li': 2.0, 'B': 2.0}	4	1.36	43.45	35	69	0.00	1.70	10.55
mp-715923	{'W': 2.0, 'O': 6.0}	8	6.68	115.22	101	199	1.17	2.12	10.55
mp-510402	{'Gd': 1.0, 'S': 1.0}	2	7.20	43.64	44	90	0.00	1.90	10.54
mp-1042	{'Hf': 4.0, 'Si': 4.0}	8	9.98	137.44	96	153	0.00	1.90	10.52
mp-1007693	{'Hf': 1.0, 'Os': 3.0}	4	19.83	62.74	117	302	0.00	2.30	10.52

mp-2731	{'Ti': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	6.68	63.85	74	100	0.00	2.14	10.51
mp-375	{'U': 1.0, 'O': 3.0}	4	6.57	72.24	63	150	1.65	1.97	10.51
mp-971933	{'Y': 1.0, 'Zr': 1.0}	2	5.45	54.84	37	58	0.00	1.85	10.49
mp-1153	{'Li': 2.0, 'S': 1.0}	3	1.63	46.82	33	40	3.54	1.82	10.47
mp-12561	{'Ta': 2.0, 'As': 4.0}	6	9.97	110.23	96	134	0.00	2.11	10.47
mp-1799	{'Ta': 2.0, 'Co': 4.0}	6	13.03	76.18	120	243	0.00	2.21	10.45
mp-644311	{'Cu': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	15.33	28.01	74	197	0.00	2.18	10.39
mp-1008922	{'Cu': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.13	18.07	64	205	0.00	2.20	10.39
mp-1009894	{'Zr': 1.0, 'C': 1.0}	2	5.15	33.28	38	135	0.55	1.79	10.39
mp-19177	{'Cr': 2.0, 'O': 4.0}	6	4.63	60.25	107	179	0.00	2.47	10.38
mp-7598	{'Nb': 2.0, 'As': 4.0}	6	7.26	110.97	90	124	0.00	2.18	10.38
mp-2058	{'Ni': 12.0, 'B': 4.0}	16	8.26	150.28	82	225	0.00	1.12	10.38
mp-569989	{'Nb': 8.0, 'C': 4.0}	12	7.67	171.23	117	228	0.00	2.01	10.38
mp-1973	{'Nb': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	7.76	64.65	87	122	0.00	2.33	10.36
mp-10052	{'Ti': 2.0, 'As': 2.0}	4	5.72	71.24	65	116	0.00	2.09	10.34
mp-568607	{'Al': 10.0, 'Mo': 2.0}	12	4.12	185.95	94	121	0.00	2.01	10.33
mp-982070	{'V': 4.0, 'Ir': 4.0}	8	14.47	111.65	137	262	0.00	2.20	10.33
mp-30858	{'Zr': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	16.83	66.74	103	228	0.00	2.22	10.33
mp-715	{'Zr': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	15.36	102.85	124	246	0.00	2.28	10.32
mp-2524	{'Nd': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	6.89	68.41	55	68	0.00	2.00	10.32
mp-32994	{'Hf': 4.0, 'N': 3.0}	7	13.41	93.64	102	225	0.00	1.88	10.29
mp-641539	{'Si': 12.0, 'N': 16.0}	28	3.83	243.07	144	255	3.55	1.95	10.28
mp-2350	{'La': 1.0, 'S': 1.0}	2	5.60	50.71	39	79	0.00	1.92	10.27
mp-976847	{'Ni': 3.0, 'Sb': 1.0}	4	9.56	51.72	49	171	0.00	1.33	10.26
mp-9761	{'Re': 2.0, 'O': 6.0}	8	8.25	94.28	106	183	0.00	2.04	10.26
mp-1008554	{'Al': 3.0, 'V': 1.0}	4	3.68	59.56	56	126	0.00	2.04	10.24
mp-980941	{'Ti': 3.0, 'N': 1.0}	4	5.18	50.53	68	125	0.00	2.10	10.24
mp-2633	{'Ge': 4.0, 'O': 8.0}	12	6.42	108.27	149	236	1.47	2.32	10.23
mp-999308	{'Os': 2.0, 'C': 2.0}	4	16.42	40.90	112	382	0.00	2.22	10.21
mp-23722	{'H': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	2.60	23.25	40	40	0.00	2.06	10.20
mp-9970	{'Sc': 2.0, 'Ge': 2.0}	4	5.04	77.43	57	89	0.00	1.99	10.19
mp-20741	{'Re': 4.0, 'O': 12.0}	16	7.13	218.20	125	240	0.00	1.96	10.18
mp-13452	{'Be': 1.0, 'Pd': 2.0}	3	9.65	38.19	66	166	0.00	1.96	10.15
mp-1008918	{'Cd': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.77	27.01	48	143	0.00	1.88	10.14
mp-2322	{'Y': 2.0, 'Al': 4.0}	6	3.88	122.31	60	80	0.00	1.94	10.13
mp-2018	{'Al': 1.0, 'Fe': 3.0}	4	6.81	47.41	74	174	0.00	2.09	10.13
mp-13100	{'Mo': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.95	63.02	104	246	0.00	2.21	10.12
mp-760	{'Fe': 2.0, 'Se': 4.0}	6	7.09	100.13	92	118	0.40	2.22	10.11
mp-1753	{'Th': 1.0, 'As': 1.0}	2	9.37	54.41	46	102	0.00	1.96	10.10
mp-1139	{'Co': 6.0, 'Mo': 2.0}	8	9.79	92.54	133	260	0.00	2.32	10.08
mp-1766	{'Tm': 1.0, 'S': 1.0}	2	8.33	40.06	45	103	0.00	1.89	10.04
mp-292	{'V': 6.0, 'As': 2.0}	8	7.12	106.21	109	194	0.00	2.22	10.04
mp-7506	{'Cr': 10.0, 'Si': 6.0}	16	6.05	189.03	133	224	0.00	2.10	10.03
mp-1017542	{'Zr': 1.0, 'Os': 3.0}	4	17.22	63.84	110	282	0.00	2.33	10.03
mp-20648	{'V': 8.0, 'C': 4.0}	12	5.74	131.77	117	244	0.00	2.11	10.00
mp-636328	{'Ti': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.03	60.79	88	178	0.00	2.25	9.99
mp-2157	{'Co': 6.0, 'W': 2.0}	8	12.92	92.67	142	279	0.00	2.28	9.98
mp-11549	{'V': 1.0, 'Pd': 2.0}	3	10.04	43.64	76	190	0.00	2.21	9.97
mp-984711	{'Cr': 3.0, 'Cu': 1.0}	4	7.80	46.73	73	211	0.00	2.02	9.97
mp-11229	{'Y': 1.0, 'Al': 1.0}	2	4.10	46.88	35	65	0.00	1.92	9.97
mp-32679	{'Nb': 10.0, 'C': 7.0}	17	7.47	225.21	133	227	0.00	2.00	9.96

mp-1002187	{'Tc': 1.0, 'B': 1.0}	2	8.45	21.37	52	324	0.00	1.92	9.95
mp-670	{'Nb': 2.0, 'Co': 4.0}	6	9.13	76.64	111	231	0.00	2.32	9.95
mp-862863	{'Pa': 3.0, 'Te': 1.0}	4	14.22	95.83	74	108	0.00	1.96	9.92
mp-2420	{'P': 4.0, 'W': 4.0}	8	12.10	117.90	117	222	0.00	2.11	9.92
mp-567889	{'Ti': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	6.55	97.87	83	112	0.00	2.12	9.91
mp-1004526	{'W': 2.0, 'S': 2.0}	4	11.06	64.85	80	180	0.00	2.09	9.90
mp-28731	{'V': 18.0, 'C': 15.0}	33	5.62	324.29	175	238	0.00	2.01	9.89
mp-1009813	{'Si': 1.0, 'Sn': 1.0}	2	4.36	55.89	38	59	0.41	2.07	9.89
mp-981385	{'Sc': 3.0, 'P': 1.0}	4	3.51	78.36	52	67	0.00	2.06	9.86
mp-1009696	{'Rh': 1.0, 'C': 1.0}	2	7.83	24.36	51	245	0.00	1.98	9.86
mp-568319	{'Dy': 1.0, 'B': 6.0}	7	5.50	68.67	62	174	0.00	1.53	9.85
mp-2006	{'V': 6.0, 'Ir': 2.0}	8	10.45	109.69	122	237	0.00	2.23	9.83
mp-829	{'Al': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	7.60	29.15	52	156	0.00	2.07	9.83
mp-1009822	{'Sn': 1.0, 'C': 1.0}	2	7.90	27.48	61	89	0.00	2.25	9.83
mp-40793	{'Si': 6.0, 'N': 8.0}	14	3.51	132.65	98	226	1.82	1.96	9.83
mp-1121	{'Ga': 1.0, 'Co': 1.0}	2	8.88	24.07	67	176	0.00	2.31	9.82
mp-8372	{'Ca': 1.0, 'Si': 2.0}	3	2.47	64.74	35	60	0.00	1.89	9.80
mp-1018659	{'Ce': 2.0, 'O': 4.0}	6	7.54	75.80	90	148	0.89	2.10	9.78
mp-978287	{'Mg': 3.0, 'Mo': 1.0}	4	3.78	74.12	53	62	0.00	2.04	9.78
mp-2251	{'Li': 3.0, 'N': 1.0}	4	1.29	44.88	34	52	1.00	1.76	9.78
mp-10734	{'Ti': 4.0, 'O': 5.0}	9	4.89	92.26	92	207	0.00	2.03	9.77
mp-999390	{'Nb': 1.0, 'Cr': 3.0}	4	7.79	53.04	75	167	0.00	2.11	9.76
mp-549706	{'Mg': 2.0, 'O': 2.0}	4	2.76	48.54	47	112	3.29	1.91	9.76
mp-2182	{'Sn': 1.0, 'As': 1.0}	2	6.56	49.01	44	160	0.00	2.08	9.74
mp-1018151	{'Nb': 1.0, 'Pd': 2.0}	3	10.56	48.08	74	190	0.00	2.20	9.73
mp-19066	{'W': 3.0, 'O': 8.0}	11	8.42	134.00	126	226	0.00	2.15	9.73
mp-1563	{'Ca': 2.0, 'Si': 2.0}	4	2.38	95.23	38	53	0.00	1.87	9.73
mp-9971	{'Y': 2.0, 'Ge': 2.0}	4	5.83	92.01	54	82	0.00	1.94	9.71
mp-1269	{'Sm': 1.0, 'S': 1.0}	2	6.64	45.59	40	91	0.00	1.90	9.71
mp-1914	{'Y': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	5.95	63.68	55	73	0.00	2.12	9.70
mp-1009720	{'Rh': 1.0, 'N': 1.0}	2	9.41	20.63	62	255	0.00	2.14	9.69
mp-984712	{'Cr': 3.0, 'Se': 1.0}	4	7.85	49.71	80	182	0.00	2.19	9.69
mp-12752	{'Zr': 4.0, 'Al': 3.0}	7	5.30	139.64	77	108	0.00	2.10	9.67
mp-1259	{'Yb': 1.0, 'Al': 3.0}	4	5.33	79.07	54	59	0.00	1.92	9.67
mp-867792	{'Re': 2.0, 'Ir': 6.0}	8	21.68	116.88	155	349	0.00	2.27	9.67
mp-755313	{'Sc': 4.0, 'O': 6.0}	10	3.82	119.78	81	174	4.16	1.95	9.66
mp-975912	{'Mo': 3.0, 'H': 1.0}	4	8.65	55.46	77	209	0.00	2.13	9.66
mp-1018849	{'Os': 3.0, 'N': 3.0}	6	15.15	67.16	128	321	0.00	2.27	9.66
mp-865611	{'Mg': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	9.44	58.60	85	182	0.00	2.25	9.66
mp-2209	{'Ce': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	6.91	67.15	55	64	0.00	2.06	9.64
mp-1944	{'Co': 4.0, 'P': 12.0}	16	4.38	230.14	115	149	0.00	2.14	9.63
mp-1002117	{'Tc': 1.0, 'N': 1.0}	2	9.65	19.27	66	372	0.00	2.21	9.61
mp-1585	{'V': 6.0, 'Co': 2.0}	8	6.99	100.68	110	211	0.00	2.28	9.60
mp-2515	{'Cr': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.54	60.32	97	231	0.00	2.16	9.60
mp-363	{'Nb': 3.0, 'Ge': 6.0}	9	7.97	148.92	105	142	0.00	2.14	9.59
mp-1025223	{'Hf': 4.0, 'Al': 3.0}	7	9.79	134.76	86	123	0.00	1.96	9.59
mp-754455	{'Sc': 4.0, 'O': 6.0}	10	3.62	126.41	79	141	4.10	1.96	9.56
mp-12666	{'Be': 12.0, 'Pd': 1.0}	13	3.22	110.62	78	124	0.00	1.69	9.55
mp-801	{'Mo': 6.0, 'Os': 2.0}	8	12.68	125.25	120	292	0.00	2.20	9.54
mp-22619	{'Ni': 4.0, 'P': 8.0}	12	4.94	162.13	98	145	0.00	2.03	9.52
mp-188	{'Al': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	16.84	60.37	91	225	0.00	2.09	9.48

mp-13686	{'Nb': 10.0, 'Si': 6.0}	16	6.97	261.58	123	194	0.00	2.07	9.48
mp-1009657	{'Ca': 1.0, 'N': 2.0}	3	2.89	39.15	43	91	0.00	1.99	9.47
mp-971752	{'Zn': 1.0, 'Cr': 3.0}	4	7.03	52.27	72	108	0.00	2.11	9.47
mp-477	{'Sm': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	7.24	66.43	54	69	0.00	2.03	9.46
mp-999263	{'Rh': 2.0, 'N': 2.0}	4	9.36	41.49	84	284	0.00	2.15	9.46
mp-568595	{'Re': 8.0, 'Si': 14.0}	22	10.17	307.56	160	210	0.03	2.01	9.45
mp-486	{'Ni': 2.0, 'P': 4.0}	6	4.48	89.50	67	102	0.58	2.01	9.45
mp-1529	{'Lu': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	16.14	37.79	64	139	0.00	2.13	9.44
mp-1009078	{'Co': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.53	16.09	58	305	0.00	2.10	9.42
mp-485	{'Zr': 2.0, 'Ni': 6.0}	8	8.43	105.35	70	170	0.00	1.55	9.39
mp-977390	{'Ta': 3.0, 'Ru': 1.0}	4	15.77	67.81	85	266	0.00	2.08	9.37
mp-1007656	{'Hf': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	12.75	64.83	86	195	0.00	2.18	9.37
mp-568718	{'Hf': 2.0, 'Al': 6.0}	8	6.26	137.66	80	106	0.00	1.97	9.35
mp-282	{'Ti': 1.0, 'F': 2.0}	3	4.07	35.01	55	109	0.44	2.16	9.35
mp-2250	{'Zr': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	8.19	84.59	73	164	0.00	1.84	9.34
mp-13164	{'Ti': 2.0, 'Pd': 1.0}	3	6.91	48.61	62	142	0.00	2.19	9.34
mp-1458	{'Nb': 6.0, 'Ir': 2.0}	8	11.23	139.30	104	223	0.00	2.09	9.34
mp-2027	{'Hf': 1.0, 'Co': 1.0}	2	12.61	31.26	56	153	0.00	2.00	9.33
mp-567907	{'P': 6.0, 'N': 10.0}	16	2.69	200.91	87	145	3.56	1.96	9.32
mp-866161	{'V': 2.0, 'Rh': 6.0}	8	10.79	110.65	127	251	0.00	2.33	9.32
mp-362	{'Ni': 3.0, 'S': 2.0}	5	5.96	66.91	56	127	0.00	1.71	9.32
mp-19773	{'Gd': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	7.54	65.37	54	80	0.00	2.03	9.32
mp-1025067	{'Re': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	11.18	98.51	99	157	0.00	2.18	9.32
mp-12794	{'Al': 2.0, 'Cu': 1.0}	3	4.00	48.73	50	90	0.00	2.14	9.29
mp-1135	{'Nb': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.87	62.97	84	200	0.00	2.23	9.29
mp-999389	{'Nb': 1.0, 'Fe': 3.0}	4	8.35	51.81	76	207	0.00	2.15	9.28
mp-2444	{'Ga': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	10.18	28.17	63	180	0.00	2.26	9.27
mp-2589	{'Mg': 4.0, 'O': 8.0}	12	3.18	117.52	85	129	3.80	1.95	9.27
mp-20457	{'In': 1.0, 'P': 1.0}	2	5.70	42.45	49	2	0.00	2.15	9.27
mp-2684	{'Tb': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	7.76	63.84	54	77	0.00	2.01	9.26
mp-30337	{'Al': 10.0, 'W': 2.0}	12	5.70	185.71	98	124	0.00	2.02	9.26
mp-22558	{'Ti': 1.0, 'Si': 1.0}	2	4.31	29.26	40	132	0.00	2.03	9.25
mp-2011	{'U': 1.0, 'P': 1.0}	2	10.37	43.07	45	96	0.00	1.88	9.24
mp-313	{'Y': 1.0, 'C': 2.0}	3	4.45	42.17	40	113	0.00	1.73	9.22
mp-1093	{'Th': 1.0, 'Ge': 1.0}	2	8.97	56.38	41	79	0.00	1.90	9.22
mp-493	{'Co': 4.0, 'B': 2.0}	6	8.18	52.21	104	247	0.00	2.23	9.21
mp-972103	{'U': 3.0, 'C': 1.0}	4	18.24	66.10	74	168	0.00	1.80	9.20
mp-30836	{'Ta': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	13.29	62.51	89	214	0.00	2.22	9.19
mp-999441	{'Nb': 3.0, 'Cr': 1.0}	4	8.00	68.64	69	199	0.00	2.13	9.18
mp-976818	{'Ni': 3.0, 'Au': 1.0}	4	12.27	50.49	57	176	0.00	1.53	9.18
mp-1782	{'Sc': 1.0, 'Se': 1.0}	2	5.00	41.14	37	81	0.00	1.95	9.17
mp-1263	{'U': 1.0, 'Ru': 3.0}	4	14.03	64.05	92	250	0.00	2.26	9.16
mp-567705	{'Ti': 4.0, 'Al': 8.0}	12	3.54	191.26	82	109	0.00	2.02	9.16
mp-668	{'Pr': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	6.68	69.71	54	68	0.00	2.12	9.15
mp-20112	{'Ni': 6.0, 'Sn': 2.0}	8	9.47	103.37	66	164	0.00	1.42	9.15
mp-1017511	{'Cr': 3.0, 'Fe': 1.0}	4	7.72	45.56	63	245	0.00	1.89	9.14
mp-30867	{'Sc': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	7.30	33.22	52	144	0.00	2.21	9.14
mp-11807	{'Li': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	11.93	28.13	51	115	0.00	1.87	9.13
mp-24192	{'Er': 1.0, 'H': 2.0}	3	8.36	33.62	53	87	0.00	1.75	9.13
mp-979011	{'Tm': 1.0, 'Zr': 1.0}	2	8.18	52.78	40	70	0.00	1.90	9.13
mp-972069	{'Ti': 3.0, 'Ga': 1.0}	4	5.39	65.69	63	118	0.00	2.17	9.12

mp-1087	{'Sr': 1.0, 'S': 1.0}	2	3.57	55.73	32	47	2.56	1.99	9.12
mp-11388	{'Ga': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	15.17	28.67	68	217	0.00	2.20	9.12
mp-1849	{'Mn': 6.0, 'P': 3.0}	9	6.71	104.62	99	194	0.00	2.09	9.12
mp-20327	{'Ti': 4.0, 'P': 8.0}	12	4.26	171.14	91	131	0.00	2.05	9.11
mp-10155	{'P': 8.0, 'Ir': 4.0}	12	9.08	185.99	129	193	0.78	2.23	9.10
mp-953	{'Nb': 1.0, 'Zn': 3.0}	4	7.80	61.54	71	119	0.00	2.14	9.09
mp-973053	{'Sc': 1.0, 'H': 3.0}	4	2.94	27.06	44	95	0.00	1.65	9.09
mp-9953	{'Hf': 4.0, 'P': 4.0}	8	9.62	144.67	86	148	0.00	1.92	9.08
mp-1018672	{'Co': 2.0, 'As': 4.0}	6	7.35	94.38	87	145	0.00	2.21	9.08
mp-867290	{'Tb': 1.0, 'Te': 1.0}	2	7.97	59.73	39	59	0.00	1.91	9.08
mp-973865	{'Pa': 1.0, 'Al': 3.0}	4	6.49	79.88	55	92	0.00	1.94	9.07
mp-2302	{'As': 1.0, 'Rh': 2.0}	3	9.78	47.69	73	231	0.00	2.30	9.06
mp-24082	{'Ta': 2.0, 'H': 1.0}	3	15.33	39.32	66	202	0.00	1.86	9.06
mp-850	{'Sc': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	6.62	81.39	60	144	0.00	1.67	9.06
mp-1601	{'Ta': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	14.56	32.16	65	264	0.00	2.20	9.05
mp-1009264	{'Nb': 1.0, 'Co': 1.0}	2	8.61	29.28	55	154	0.00	2.18	9.05
mp-571053	{'Al': 10.0, 'Mo': 2.0}	12	4.12	186.07	86	119	0.00	2.02	9.05
mp-725	{'Rh': 2.0, 'O': 4.0}	6	6.89	65.06	94	234	0.00	2.26	9.04
mp-30866	{'Rh': 6.0, 'W': 2.0}	8	14.09	116.09	132	283	0.00	2.31	9.03
mp-999543	{'Mn': 1.0, 'Co': 3.0}	4	8.96	42.95	102	70	0.00	2.46	9.02
mp-635	{'Sc': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	9.60	61.18	84	184	0.00	2.31	9.01
mp-730	{'P': 8.0, 'Pt': 4.0}	12	8.96	190.58	117	177	1.13	2.11	8.99
mp-481	{'Sc': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	16.24	64.45	90	200	0.00	2.17	8.99
mp-22270	{'Co': 4.0, 'P': 4.0}	8	6.48	92.11	111	193	0.00	2.36	8.99
mp-19006	{'Mn': 2.0, 'O': 2.0}	4	5.19	45.39	65	143	0.20	2.13	8.98
mp-458	{'Ti': 4.0, 'O': 6.0}	10	4.52	105.52	87	216	0.00	2.01	8.98
mp-2573	{'Np': 1.0, 'Al': 3.0}	4	6.83	77.26	57	60	0.00	1.95	8.98
mp-568505	{'As': 4.0, 'C': 3.0}	7	5.70	97.86	77	112	0.10	2.02	8.97
mp-1009835	{'Ta': 1.0, 'C': 1.0}	2	14.64	21.89	58	291	0.00	1.92	8.96
mp-570553	{'Fe': 4.0, 'P': 16.0}	20	4.09	292.02	114	141	0.90	2.09	8.96
mp-568711	{'V': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.32	59.56	82	180	0.00	2.23	8.96
mp-30787	{'Mo': 2.0, 'Rh': 6.0}	8	11.61	115.80	127	268	0.00	2.36	8.95
mp-568671	{'V': 10.0, 'Si': 6.0}	16	5.38	209.27	120	194	0.00	2.15	8.94
mp-30825	{'Pa': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	13.35	67.15	88	211	0.00	2.26	8.90
mp-20905	{'Os': 4.0, 'S': 8.0}	12	9.30	181.72	139	194	0.00	2.34	8.89
mp-894	{'Zn': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	14.74	29.34	63	172	0.00	2.13	8.89
mp-600561	{'Li': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	6.73	27.11	47	108	0.00	2.05	8.86
mp-10905	{'Al': 3.0, 'Pt': 2.0}	5	9.60	81.48	74	153	0.00	2.00	8.86
mp-2417	{'Dy': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	18.37	66.81	91	208	0.00	2.15	8.84
mp-571491	{'Ho': 1.0, 'B': 6.0}	7	5.57	68.45	58	175	0.00	1.53	8.84
mp-2713	{'Er': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	15.21	39.24	55	145	0.00	2.01	8.84
mp-695	{'Ti': 2.0, 'Co': 4.0}	6	7.52	73.17	94	168	0.00	2.26	8.83
mp-976870	{'Na': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	6.48	50.99	37	107	0.00	1.24	8.82
mp-982734	{'W': 2.0, 'N': 4.0}	6	10.09	69.75	90	253	0.00	2.05	8.82
mp-24723	{'Ta': 1.0, 'H': 2.0}	3	12.98	23.40	64	226	0.00	1.75	8.82
mp-858	{'Tm': 2.0, 'Al': 4.0}	6	6.24	118.59	62	82	0.00	1.88	8.81
mp-10000	{'Hf': 4.0, 'S': 2.0}	6	11.04	117.08	74	131	0.00	1.87	8.79
mp-21030	{'Ti': 6.0, 'Sn': 2.0}	8	6.05	143.98	88	117	0.00	2.20	8.79
mp-649	{'Fe': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	18.37	57.94	92	267	0.00	2.13	8.78
mp-19009	{'Ni': 2.0, 'O': 2.0}	4	6.62	37.49	69	204	2.41	2.07	8.78
mp-1009848	{'Tc': 1.0, 'C': 1.0}	2	7.35	24.87	45	237	0.00	1.94	8.78

mp-7142	{'Os': 1.0, 'C': 1.0}	2	16.34	20.55	74	384	0.00	2.23	8.78
mp-19923	{'Gd': 2.0, 'Al': 4.0}	6	5.66	123.92	59	114	0.00	1.89	8.77
mp-971779	{'Zn': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	11.03	56.32	90	208	0.00	2.34	8.77
mp-1405	{'Tb': 2.0, 'Ge': 2.0}	4	8.28	92.84	54	69	0.00	1.86	8.77
mp-11416	{'Ta': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	10.07	64.36	80	106	0.00	2.23	8.76
mp-608	{'Ti': 1.0, 'Co': 3.0}	4	7.95	46.94	83	194	0.00	2.33	8.74
mp-2772	{'Zr': 4.0, 'Al': 8.0}	12	4.52	213.31	87	113	0.00	2.06	8.73
mp-568565	{'Cr': 2.0, 'As': 2.0}	4	6.51	64.77	66	88	0.00	2.17	8.73
mp-1578	{'V': 6.0, 'Rh': 2.0}	8	7.76	109.41	105	217	0.00	2.28	8.73
mp-1415	{'Ca': 1.0, 'Se': 1.0}	2	3.73	53.05	30	44	2.14	1.90	8.72
mp-1009792	{'Ru': 1.0, 'C': 1.0}	2	7.89	23.80	52	223	0.71	2.11	8.71
mp-448	{'Co': 1.0, 'N': 1.0}	2	6.28	19.28	49	251	0.00	2.07	8.71
mp-978554	{'Sm': 1.0, 'Re': 3.0}	4	16.88	69.74	77	213	0.00	1.98	8.70
mp-30788	{'Sn': 2.0, 'Mo': 6.0}	8	10.01	134.83	101	217	0.00	2.17	8.70
mp-2105	{'Hf': 6.0, 'Si': 4.0}	10	10.83	181.47	95	145	0.00	1.90	8.70
mp-1400	{'Hf': 2.0, 'W': 4.0}	6	16.35	110.91	94	223	0.00	2.04	8.68
mp-567617	{'Rh': 4.0, 'N': 8.0}	12	7.65	113.71	121	213	0.00	2.11	8.68
mp-16506	{'Li': 3.0, 'Al': 2.0}	5	1.54	80.71	35	39	0.00	1.79	8.67
mp-2030	{'Ru': 4.0, 'S': 8.0}	12	6.07	180.92	121	131	0.68	2.36	8.65
mp-567456	{'Ca': 1.0, 'Ge': 2.0}	3	4.20	73.34	38	44	0.00	1.89	8.65
mp-33009	{'Mn': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.96	116.39	112	175	0.46	2.21	8.64
mp-7497	{'Th': 1.0, 'Si': 2.0}	3	7.79	61.42	47	106	0.00	1.87	8.64
mp-1610	{'Tb': 1.0, 'S': 1.0}	2	7.41	42.81	38	96	0.00	1.87	8.63
mp-976893	{'Ni': 6.0, 'Sb': 2.0}	8	9.64	102.57	59	140	0.00	1.30	8.63
mp-11661	{'Zr': 6.0, 'N': 8.0}	14	6.93	158.02	111	195	0.69	1.99	8.63
mp-24658	{'Sm': 1.0, 'H': 2.0}	3	6.46	39.15	45	73	0.00	1.74	8.63
mp-632311	{'Ta': 2.0, 'H': 1.0}	3	15.32	39.33	64	202	0.00	1.86	8.61
mp-1804	{'Fe': 6.0, 'N': 2.0}	8	7.42	81.24	96	207	0.00	2.08	8.60
mp-861931	{'Li': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	16.69	58.91	84	179	0.00	2.06	8.59
mp-7285	{'Hf': 3.0, 'Ni': 9.0}	12	11.44	154.40	83	181	0.00	1.46	8.56
mp-2534	{'Ga': 1.0, 'As': 1.0}	2	5.05	47.53	41	61	0.18	2.20	8.56
mp-1423	{'Ho': 1.0, 'C': 2.0}	3	7.64	41.09	45	113	0.00	1.70	8.56
mp-20868	{'Fe': 8.0, 'W': 4.0}	12	13.28	147.82	137	259	0.00	2.12	8.55
mp-1013587	{'Sr': 3.0, 'Bi': 2.0}	5	4.64	243.55	43	182	0.00	1.97	8.55
mp-30685	{'Zr': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	7.06	70.64	72	97	0.00	2.31	8.54
mp-20122	{'Dy': 2.0, 'Ge': 2.0}	4	8.51	91.78	55	63	0.00	1.90	8.52
mp-1011375	{'Ce': 1.0, 'Se': 2.0}	3	7.12	69.49	48	69	0.00	1.99	8.51
mp-7226	{'V': 6.0, 'Ni': 2.0}	8	6.90	101.83	93	201	0.00	2.16	8.51
mp-2264	{'Er': 2.0, 'Ge': 2.0}	4	8.96	88.94	55	82	0.00	1.87	8.50
mp-1989	{'Ta': 10.0, 'Si': 6.0}	16	12.79	256.86	133	215	0.00	1.99	8.50
mp-1652	{'Zn': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	9.83	29.03	55	139	0.00	2.17	8.50
mp-1208	{'Er': 2.0, 'Al': 4.0}	6	6.14	119.64	61	82	0.00	1.91	8.50
mp-1256	{'Ho': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	8.08	62.58	53	75	0.00	2.04	8.48
mp-21065	{'Si': 4.0, 'P': 8.0}	12	3.16	189.33	77	84	0.00	2.04	8.48
mp-189	{'Si': 4.0, 'Ru': 4.0}	8	8.04	106.77	99	204	0.25	2.19	8.48
mp-2552	{'Te': 2.0, 'O': 6.0}	8	6.00	97.26	96	90	1.30	2.23	8.46
mp-6927	{'Np': 1.0, 'O': 1.0}	2	14.66	28.66	56	193	0.00	2.00	8.46
mp-570904	{'Ga': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	8.72	71.24	54	164	0.00	1.41	8.46
mp-27953	{'Mo': 4.0, 'N': 2.0}	6	9.31	73.48	88	300	0.00	2.12	8.45
mp-10901	{'Al': 3.0, 'Pd': 2.0}	5	6.00	81.35	63	129	0.00	2.04	8.45
mp-510404	{'Gd': 1.0, 'Se': 1.0}	2	7.76	50.52	37	90	0.00	1.88	8.44

mp-22205	{'In': 2.0, 'N': 2.0}	4	6.64	64.41	66	104	0.48	2.20	8.44
mp-922	{'Co': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	18.18	58.85	91	221	0.00	2.16	8.44
mp-998947	{'Ti': 1.0, 'Ru': 3.0}	4	10.14	57.49	93	246	0.00	2.48	8.44
mp-570276	{'Zr': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	6.95	37.43	47	108	0.02	2.19	8.44
mp-1118	{'Si': 4.0, 'Ni': 8.0}	12	7.35	131.51	64	193	0.00	1.27	8.41
mp-8882	{'Ga': 2.0, 'P': 2.0}	4	4.01	83.39	51	76	1.30	2.15	8.41
mp-11566	{'Sc': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	4.85	37.81	40	75	0.00	2.13	8.41
mp-30835	{'Ta': 1.0, 'Pd': 2.0}	3	13.65	47.92	72	205	0.00	2.18	8.41
mp-16342	{'Ho': 2.0, 'Ge': 2.0}	4	8.75	90.15	54	82	0.00	1.88	8.39
mp-20064	{'Dy': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	7.89	63.51	53	68	0.00	2.06	8.39
mp-1180	{'Mn': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.43	60.98	92	217	0.00	2.22	8.39
mp-1120	{'Mo': 6.0, 'Ir': 2.0}	8	12.73	125.21	108	288	0.00	2.17	8.38
mp-2612	{'Ge': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.13	54.23	37	39	0.62	2.00	8.37
mp-24151	{'Dy': 1.0, 'H': 2.0}	3	7.77	35.18	49	83	0.00	1.77	8.36
mp-541840	{'Dy': 1.0, 'C': 2.0}	3	7.40	41.87	44	116	0.00	1.71	8.34
mp-1296	{'Er': 1.0, 'B': 6.0}	7	5.65	68.24	56	175	0.00	1.53	8.34
mp-1081	{'V': 3.0, 'S': 4.0}	7	4.30	108.61	70	98	0.00	2.13	8.34
mp-977138	{'Na': 1.0, 'Tc': 3.0}	4	8.73	60.28	71	193	0.00	2.18	8.33
mp-1174	{'Mg': 1.0, 'Sc': 1.0}	2	2.47	46.53	27	48	0.00	1.96	8.33
mp-985806	{'Al': 2.0, 'Cu': 1.0}	3	4.06	48.00	47	100	0.00	2.15	8.32
mp-2061	{'Th': 1.0, 'Tl': 3.0}	4	12.36	113.51	70	164	0.00	2.20	8.31
mp-998986	{'Ti': 3.0, 'Si': 1.0}	4	4.59	62.18	55	144	0.00	2.13	8.30
mp-2470	{'Dy': 1.0, 'S': 1.0}	2	7.68	42.08	38	98	0.00	1.89	8.29
mp-818	{'Si': 4.0, 'Rh': 4.0}	8	7.76	112.06	95	195	0.00	2.19	8.29
mp-675	{'Zr': 2.0, 'W': 4.0}	6	13.52	112.72	87	215	0.00	2.08	8.28
mp-19399	{'Cr': 4.0, 'O': 6.0}	10	4.90	102.92	113	203	2.43	2.42	8.26
mp-803	{'Dy': 2.0, 'Al': 4.0}	6	5.91	121.68	59	79	0.00	1.91	8.25
mp-1014231	{'Hf': 2.0, 'Zn': 1.0}	3	11.76	59.66	59	109	0.00	2.04	8.25
mp-11476	{'Ho': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	14.91	39.77	52	139	0.00	2.01	8.25
mp-1648	{'Al': 12.0, 'Re': 1.0}	13	3.96	214.05	79	96	0.00	1.96	8.24
mp-30746	{'Y': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	11.49	40.64	50	129	0.00	2.09	8.24
mp-20344	{'Fe': 3.0, 'Ge': 1.0}	4	8.30	48.03	68	177	0.00	2.08	8.23
mp-1240	{'Ho': 1.0, 'S': 1.0}	2	7.90	41.40	38	98	0.00	1.87	8.22
mp-569544	{'Zr': 2.0, 'Te': 2.0}	4	7.52	96.67	57	93	0.00	2.08	8.20
mp-24096	{'Nd': 1.0, 'H': 2.0}	3	5.85	41.54	41	73	0.00	1.72	8.20
mp-1748	{'Nd': 1.0, 'S': 1.0}	2	6.15	47.63	34	81	0.00	1.88	8.19
mp-13154	{'Fe': 6.0, 'C': 2.0}	8	7.33	81.31	91	198	0.00	2.06	8.19
mp-549	{'Sc': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	5.41	51.15	35	65	0.00	2.01	8.16
mp-1299	{'Si': 1.0, 'Pt': 2.0}	3	14.62	47.50	67	203	0.00	2.07	8.16
mp-16719	{'Al': 12.0, 'Tc': 1.0}	13	3.28	213.70	74	95	0.00	1.97	8.15
mp-2263	{'Sc': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	14.01	101.82	100	220	0.00	2.24	8.15
mp-756	{'Tb': 2.0, 'Al': 4.0}	6	5.76	122.85	57	77	0.00	1.89	8.15
mp-776490	{'Al': 16.0, 'O': 24.0}	40	3.91	346.38	144	228	5.44	1.93	8.15
mp-1868	{'V': 4.0, 'S': 4.0}	8	5.07	108.71	80	147	0.00	2.15	8.15
mp-20632	{'U': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	10.06	62.33	56	68	0.00	2.05	8.12
mp-1986	{'Zn': 1.0, 'O': 1.0}	2	5.45	24.82	40	127	0.63	1.98	8.12
mp-33137	{'Tc': 4.0, 'O': 8.0}	12	6.58	131.22	111	256	0.00	2.18	8.11
mp-10694	{'Sc': 1.0, 'F': 3.0}	4	2.51	67.40	41	89	6.11	2.04	8.11
mp-559092	{'Sc': 1.0, 'F': 3.0}	4	2.51	67.36	41	91	6.11	2.04	8.10
mp-377	{'Lu': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	12.19	37.84	54	137	0.00	2.17	8.09
mp-1008786	{'Mg': 1.0, 'Te': 1.0}	2	4.72	53.44	32	54	0.63	1.96	8.09

mp-246	{'Ti': 1.0, 'F': 3.0}	4	2.82	61.65	45	104	0.00	2.10	8.09
mp-1623	{'Er': 1.0, 'S': 1.0}	2	8.11	40.79	38	107	0.00	1.88	8.08
mp-7591	{'Ge': 1.0, 'As': 1.0}	2	5.80	42.21	38	62	0.00	2.04	8.07
mp-1655	{'U': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	19.34	106.87	96	545	0.00	2.07	8.07
mp-1169	{'Sc': 1.0, 'Cu': 1.0}	2	5.22	34.50	43	81	0.00	2.21	8.07
mp-1714	{'Fe': 8.0, 'Si': 16.0}	24	4.96	300.08	127	181	0.70	2.09	8.07
mp-1234	{'Lu': 2.0, 'Al': 4.0}	6	6.50	116.92	61	82	0.00	1.92	8.06
mp-1545	{'Nb': 6.0, 'Rh': 2.0}	8	9.09	139.48	89	204	0.00	2.12	8.06
mp-31178	{'Dy': 1.0, 'Al': 3.0}	4	5.02	80.52	47	71	0.00	1.95	8.05
mp-1039019	{'Mg': 1.0, 'Al': 1.0}	2	2.19	38.93	26	50	0.00	1.94	8.04
mp-1008999	{'La': 1.0, 'Se': 1.0}	2	7.06	51.21	38	40	0.00	1.99	8.03
mp-432	{'Nb': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	9.95	32.36	53	237	0.00	2.21	8.03
mp-825	{'Ru': 2.0, 'O': 4.0}	6	6.82	64.81	93	252	0.00	2.37	8.02
mp-10186	{'Pu': 1.0, 'Si': 2.0}	3	9.03	55.21	48	93	0.00	1.86	8.02
mp-1547	{'Ni': 3.0, 'S': 3.0}	6	5.48	82.55	58	124	0.00	1.84	8.01
mp-10913	{'Ge': 4.0, 'O': 8.0}	12	6.07	114.51	121	208	1.53	2.30	8.01
mp-865022	{'Mn': 2.0, 'Ir': 6.0}	8	18.81	111.53	136	264	0.00	2.31	8.01
mp-856	{'Sn': 2.0, 'O': 4.0}	6	6.61	75.73	87	172	1.41	2.33	8.01
mp-7655	{'Ba': 1.0, 'Si': 2.0}	3	4.13	77.80	36	49	0.00	1.93	8.00
mp-571247	{'Al': 12.0, 'Mo': 4.0}	16	4.82	243.64	97	136	0.11	2.04	8.00
mp-11387	{'Hf': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	9.30	69.24	71	102	0.00	2.22	7.99
mp-20541	{'V': 8.0, 'P': 4.0}	12	5.76	153.20	102	207	0.00	2.18	7.99
mp-1996	{'Nd': 1.0, 'Ir': 3.0}	4	16.95	70.64	84	189	0.00	2.19	7.99
mp-7558	{'Ta': 3.0, 'Ge': 6.0}	9	10.99	147.94	102	144	0.00	2.12	7.98
mp-238	{'Mn': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	8.76	30.58	51	134	0.00	2.19	7.97
mp-873	{'V': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.40	59.12	76	178	0.00	2.23	7.96
mp-2430	{'Zr': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	7.05	111.42	73	107	0.00	2.15	7.95
mp-2483	{'Dy': 2.0, 'Mn': 4.0}	6	9.61	94.14	78	116	0.00	2.04	7.95
mp-1017544	{'Zr': 1.0, 'Ru': 3.0}	4	10.42	62.84	81	214	0.00	2.35	7.94
mp-10695	{'Zn': 1.0, 'S': 1.0}	2	4.00	40.48	33	68	2.35	2.02	7.94
mp-286	{'Yb': 1.0, 'Se': 1.0}	2	8.08	51.76	36	52	2.03	1.87	7.93
mp-1017543	{'Zr': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.34	65.92	75	151	0.00	2.26	7.87
mp-550172	{'Sn': 2.0, 'O': 4.0}	6	6.63	75.52	86	172	0.82	2.32	7.87
mp-10652	{'Sm': 1.0, 'Te': 1.0}	2	8.12	56.85	37	60	0.00	1.96	7.86
mp-23710	{'Mg': 2.0, 'H': 4.0}	6	1.42	61.39	35	50	3.90	1.67	7.83
mp-19940	{'V': 4.0, 'As': 4.0}	8	6.80	122.98	86	140	0.00	2.19	7.82
mp-558852	{'Fe': 1.0, 'F': 3.0}	4	3.13	59.81	49	104	2.97	2.19	7.81
mp-20131	{'Y': 1.0, 'In': 3.0}	4	7.14	100.85	55	195	0.00	2.14	7.80
mp-11578	{'V': 1.0, 'Zn': 3.0}	4	7.29	56.26	65	113	0.00	2.17	7.79
mp-2856	{'Mn': 4.0, 'Al': 11.0}	15	4.07	210.84	85	125	0.00	1.97	7.79
mp-2723	{'Ir': 2.0, 'O': 4.0}	6	11.30	65.88	104	270	0.00	2.32	7.79
mp-1342	{'Ba': 1.0, 'O': 1.0}	2	5.75	44.26	38	68	2.26	2.10	7.78
mp-1332	{'Si': 6.0, 'Mo': 10.0}	16	8.08	231.80	120	241	0.00	2.13	7.77
mp-1941	{'Ga': 1.0, 'Ni': 1.0}	2	8.62	24.73	42	153	0.00	1.87	7.77
mp-2108	{'Ti': 10.0, 'Si': 6.0}	16	4.35	247.22	94	139	0.00	2.08	7.76
mp-590	{'Ni': 2.0, 'As': 2.0}	4	7.64	58.07	46	134	0.00	1.66	7.76
mp-11564	{'Tm': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	11.66	38.72	49	128	0.00	2.10	7.75
mp-1425	{'Ti': 2.0, 'Cr': 4.0}	6	6.24	80.86	75	199	0.00	2.20	7.74
mp-7948	{'Re': 4.0, 'Si': 4.0}	8	12.83	110.95	93	246	0.00	1.98	7.73
mp-11272	{'Be': 4.0, 'Nb': 6.0}	10	6.85	143.80	78	165	0.00	1.89	7.72
mp-642644	{'V': 2.0, 'H': 1.0}	3	5.91	28.90	52	191	0.00	2.04	7.72

mp-2422	{'Er': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	8.21	62.06	50	72	0.00	2.04	7.70
mp-1007657	{'Hf': 1.0, 'Ru': 3.0}	4	12.92	61.90	86	202	0.00	2.36	7.70
mp-19889	{'Th': 1.0, 'Pb': 1.0}	2	12.02	60.70	42	75	0.00	2.00	7.69
mp-2088	{'Ce': 2.0, 'Al': 4.0}	6	5.12	125.78	53	76	0.00	1.91	7.69
mp-11397	{'Ga': 3.0, 'Ni': 2.0}	5	7.68	70.58	63	123	0.00	1.97	7.69
mp-12765	{'Gd': 1.0, 'C': 2.0}	3	6.88	43.78	41	106	0.00	1.74	7.69
mp-1495	{'Er': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	16.99	107.82	91	197	0.00	2.08	7.68
mp-1007730	{'Hf': 1.0, 'Al': 3.0}	4	6.28	68.60	51	105	0.00	1.97	7.68
mp-1473	{'Fe': 7.0, 'W': 6.0}	13	14.56	170.41	132	270	0.00	2.10	7.66
mp-571622	{'Be': 12.0, 'Pt': 1.0}	13	4.59	109.75	76	133	0.00	1.70	7.65
mp-2404	{'Ca': 2.0, 'Al': 4.0}	6	2.43	128.78	41	56	0.00	1.91	7.65
mp-2725	{'Tb': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	16.46	109.63	89	186	0.00	2.08	7.65
mp-21117	{'Fe': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	7.72	86.54	77	120	0.00	2.15	7.64
mp-982779	{'Nb': 1.0, 'Te': 1.0}	2	8.35	43.87	47	107	0.00	2.26	7.63
mp-2520	{'Tm': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	8.35	57.79	37	61	0.00	1.98	7.63
mp-1099	{'Ni': 4.0, 'Ge': 4.0}	8	7.99	109.23	62	136	0.00	1.61	7.63
mp-567747	{'Co': 7.0, 'Mo': 6.0}	13	9.87	166.28	126	264	0.00	2.22	7.62
mp-975906	{'Li': 1.0, 'Al': 3.0}	4	2.23	65.46	34	63	0.00	1.87	7.61
mp-742	{'Ti': 2.0, 'Cu': 1.0}	3	5.72	46.22	55	126	0.00	2.29	7.61
mp-2699	{'Ca': 2.0, 'Si': 4.0}	6	2.43	131.77	40	61	0.00	1.89	7.60
mp-13853	{'P': 12.0, 'Ir': 4.0}	16	7.17	264.08	114	170	0.09	2.17	7.60
mp-974458	{'Re': 3.0, 'F': 1.0}	4	16.84	56.95	81	269	0.00	2.13	7.60
mp-7870	{'Gd': 1.0, 'O': 1.0}	2	7.34	39.20	38	102	0.00	1.97	7.60
mp-778	{'Fe': 6.0, 'P': 3.0}	9	7.08	100.33	89	216	0.00	2.08	7.58
mp-1932	{'Nb': 6.0, 'Os': 2.0}	8	11.21	138.96	91	223	0.00	2.11	7.57
mp-556605	{'Zr': 4.0, 'O': 8.0}	12	5.78	141.64	92	190	3.71	2.05	7.57
mp-985825	{'Al': 3.0, 'Cu': 1.0}	4	4.02	59.65	49	93	0.00	2.09	7.56
mp-1358	{'Dy': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	16.67	108.99	89	191	0.00	2.08	7.56
mp-810	{'Ni': 2.0, 'Sb': 2.0}	4	8.56	69.98	50	114	0.00	1.81	7.55
mp-8102	{'W': 3.0, 'N': 4.0}	7	13.35	75.54	97	315	0.00	2.06	7.55
mp-567996	{'Nb': 10.0, 'Si': 6.0}	16	7.01	260.14	105	191	0.00	2.07	7.55
mp-22749	{'Mn': 10.0, 'C': 4.0}	14	7.70	128.88	112	220	0.00	2.02	7.54
mp-1867	{'Ta': 4.0, 'Ni': 2.0}	6	14.79	94.47	81	215	0.00	1.96	7.54
mp-2132	{'Cr': 4.0, 'N': 4.0}	8	6.15	71.33	87	181	0.00	2.12	7.53
mp-34688	{'Ti': 2.0, 'O': 4.0}	6	3.77	70.26	56	182	1.98	2.00	7.52
mp-996	{'Os': 2.0, 'O': 4.0}	6	11.23	65.73	103	281	0.00	2.34	7.52
mp-11280	{'Ti': 1.0, 'Be': 12.0}	13	2.28	113.51	59	122	0.00	1.70	7.51
mp-7822	{'Sc': 10.0, 'Si': 6.0}	16	3.25	315.59	72	89	0.00	1.94	7.49
mp-1523	{'Zr': 4.0, 'P': 8.0}	12	5.02	202.70	80	127	0.00	2.03	7.49
mp-976	{'V': 12.0, 'Si': 10.0}	22	5.14	288.23	119	183	0.00	2.13	7.49
mp-2191	{'Er': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	8.22	58.40	37	57	0.00	2.00	7.48
mp-12657	{'Hf': 4.0, 'Al': 8.0}	12	7.42	208.17	88	120	0.00	1.98	7.47
mp-1025425	{'Co': 6.0, 'H': 2.0}	8	8.57	68.94	113	214	0.00	2.34	7.46
mp-2762	{'Y': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	14.36	109.47	88	196	0.00	2.15	7.46
mp-865428	{'U': 2.0, 'P': 6.0}	8	8.29	132.59	75	95	0.00	1.94	7.45
mp-2695	{'Sb': 4.0, 'Os': 2.0}	6	10.88	132.35	87	129	0.40	2.32	7.44
mp-24095	{'Pr': 1.0, 'H': 2.0}	3	5.52	42.99	39	77	0.00	1.79	7.43
mp-20034	{'Ca': 1.0, 'Pb': 1.0}	2	6.78	60.52	35	49	0.00	2.03	7.43
mp-2724	{'Tb': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	7.71	60.43	35	56	0.00	1.97	7.42
mp-998982	{'Ti': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	6.03	72.21	55	149	0.00	2.16	7.42
mp-570751	{'Nb': 6.0, 'Te': 2.0}	8	9.05	149.12	85	167	0.00	2.15	7.41

mp-15679	{'Co': 2.0, 'As': 2.0}	4	8.04	55.29	74	163	0.00	2.37	7.41
mp-2287	{'Si': 4.0, 'Rh': 4.0}	8	8.03	108.37	90	184	0.00	2.19	7.39
mp-2385	{'Ta': 2.0, 'Cr': 4.0}	6	11.34	83.47	83	242	0.00	2.11	7.39
mp-1822	{'Ti': 4.0, 'As': 4.0}	8	5.84	139.74	72	119	0.00	2.10	7.38
mp-806	{'Pu': 1.0, 'O': 1.0}	2	14.03	30.78	49	117	0.00	1.98	7.38
mp-685097	{'Hf': 4.0, 'O': 8.0}	12	10.37	134.77	106	210	4.39	1.98	7.36
mp-390	{'Ti': 2.0, 'O': 4.0}	6	3.76	70.48	55	179	2.06	2.00	7.36
mp-11454	{'Hf': 2.0, 'Pd': 1.0}	3	13.11	58.67	55	137	0.00	2.00	7.36
mp-22631	{'Co': 4.0, 'N': 2.0}	6	7.92	55.30	88	245	0.00	2.24	7.35
mp-30581	{'Hf': 2.0, 'Cu': 1.0}	3	12.40	56.30	58	123	0.00	2.09	7.35
mp-1913	{'Er': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	18.09	69.07	77	178	0.00	2.11	7.34
mp-1609	{'Cr': 6.0, 'Ir': 2.0}	8	11.50	100.54	104	276	0.00	2.22	7.33
mp-20997	{'In': 1.0, 'Ni': 1.0}	2	9.24	31.17	41	126	0.00	1.94	7.32
mp-2341	{'Li': 6.0, 'N': 2.0}	8	1.66	69.86	46	65	1.42	1.83	7.31
mp-2281	{'Sm': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	7.14	63.28	33	57	0.00	1.96	7.30
mp-1007852	{'Fe': 1.0, 'Co': 3.0}	4	8.69	44.43	80	183	0.00	2.39	7.30
mp-999396	{'Nb': 3.0, 'Ni': 1.0}	4	8.51	65.87	62	48	0.00	2.10	7.30
mp-1378	{'Li': 2.0, 'C': 2.0}	4	1.33	47.43	29	42	3.45	1.81	7.30
mp-2050	{'Ho': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	8.06	59.04	36	63	0.00	2.01	7.30
mp-333	{'Hf': 2.0, 'Fe': 4.0}	6	11.27	85.54	82	162	0.00	2.10	7.29
mp-555	{'Fe': 8.0, 'N': 1.0}	9	7.57	101.09	88	182	0.00	2.06	7.28
mp-30383	{'Hf': 2.0, 'Au': 1.0}	3	14.87	61.86	59	134	0.00	2.06	7.28
mp-468	{'Al': 2.0, 'F': 6.0}	8	3.02	92.31	62	45	7.72	2.04	7.28
mp-983459	{'Hf': 1.0, 'Zr': 1.0}	2	9.74	45.98	42	101	0.00	2.08	7.26
mp-974457	{'Ru': 3.0, 'I': 1.0}	4	11.33	63.04	81	227	0.00	2.40	7.26
mp-567832	{'Ti': 2.0, 'Te': 2.0}	4	6.84	85.22	53	87	0.00	2.10	7.26
mp-2381	{'Er': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	11.42	39.30	46	126	0.00	2.09	7.25
mp-18937	{'V': 4.0, 'O': 6.0}	10	4.64	107.19	80	202	0.49	2.09	7.25
mp-22478	{'Fe': 3.0, 'Ge': 3.0}	6	7.40	86.53	73	145	0.00	2.15	7.23
mp-1439	{'Ti': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.20	126.30	81	204	2.55	2.03	7.23
mp-7131	{'Pr': 1.0, 'Te': 1.0}	2	7.47	59.66	36	58	0.00	2.06	7.22
mp-2644	{'Co': 2.0, 'Sb': 2.0}	4	8.87	67.67	69	137	0.00	2.30	7.22
mp-1518	{'Ce': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	11.05	67.46	72	154	0.00	2.26	7.22
mp-8101	{'W': 1.0, 'N': 2.0}	3	11.75	29.95	63	310	0.00	2.07	7.22
mp-973181	{'Mn': 3.0, 'Zn': 1.0}	4	8.12	47.05	61	181	0.00	2.05	7.21
mp-1841	{'Si': 2.0, 'Ir': 6.0}	8	17.87	112.39	119	299	0.00	2.26	7.21
mp-2053	{'Nb': 6.0, 'Sb': 2.0}	8	8.87	149.89	82	174	0.00	2.14	7.21
mp-1007	{'Dy': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	7.91	59.70	36	59	0.00	2.03	7.20
mp-1018075	{'Fe': 2.0, 'Se': 2.0}	4	7.88	56.84	61	103	0.00	2.12	7.20
mp-1150	{'U': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	13.86	65.50	76	217	0.00	2.23	7.19
mp-999133	{'Ta': 2.0, 'Pd': 2.0}	4	14.24	67.02	71	204	0.00	2.12	7.18
mp-972036	{'W': 2.0, 'N': 2.0}	4	13.76	47.76	71	291	0.00	2.04	7.16
mp-776475	{'Al': 16.0, 'O': 24.0}	40	3.75	361.66	127	216	5.22	1.91	7.15
mp-1018115	{'Pb': 2.0, 'S': 2.0}	4	7.18	110.74	50	26	1.27	2.03	7.15
mp-2858	{'Zr': 4.0, 'O': 8.0}	12	5.56	147.11	85	183	3.54	2.02	7.15
mp-430	{'Ti': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.43	119.61	85	152	2.23	2.06	7.15
mp-30777	{'Mg': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	16.21	62.43	76	182	0.00	2.14	7.14
mp-1014219	{'Hf': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	11.23	36.05	45	105	0.00	2.04	7.14
mp-11697	{'Ta': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	10.20	138.27	73	102	0.00	2.15	7.13
mp-2495	{'Pr': 1.0, 'S': 1.0}	2	5.87	48.97	32	82	0.00	1.96	7.13
mp-1009733	{'Ca': 2.0, 'Si': 1.0}	3	1.95	92.11	24	35	0.68	1.87	7.12

mp-2211	{'V': 6.0, 'Pt': 2.0}	8	10.35	111.64	94	218	0.00	2.18	7.11
mp-978918	{'Tb': 1.0, 'Zr': 1.0}	2	7.64	54.35	32	64	0.00	1.86	7.10
mp-416	{'Cr': 6.0, 'Os': 2.0}	8	11.45	100.43	103	282	0.00	2.24	7.09
mp-1008568	{'Zr': 1.0, 'Ti': 2.0}	3	5.33	58.24	48	105	0.00	2.27	7.08
mp-2283	{'Zr': 1.0, 'Co': 1.0}	2	7.65	32.60	44	131	0.00	2.18	7.08
mp-569522	{'Mn': 6.0, 'P': 24.0}	30	4.06	439.20	115	137	0.52	2.07	7.08
mp-10721	{'Ti': 8.0, 'C': 4.0}	12	4.44	161.19	78	139	0.00	2.04	7.07
mp-2624	{'Al': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	4.08	60.56	30	49	1.26	2.11	7.06
mp-1482	{'Zr': 4.0, 'Al': 6.0}	10	4.65	188.09	69	108	0.00	2.06	7.06
mp-1272	{'Cr': 6.0, 'Ru': 2.0}	8	8.59	99.42	96	264	0.00	2.28	7.06
mp-191	{'Y': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	7.80	40.85	42	109	0.00	2.18	7.06
mp-22469	{'In': 2.0, 'Ni': 6.0}	8	9.25	104.49	53	149	0.00	1.37	7.06
mp-352	{'Hf': 4.0, 'O': 8.0}	12	9.97	140.26	99	205	4.07	1.96	7.05
mp-21845	{'Fe': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.54	59.10	71	174	0.00	2.25	7.05
mp-16726	{'Li': 4.0, 'B': 4.0}	8	1.09	108.26	33	42	0.00	1.72	7.04
mp-11393	{'Nb': 6.0, 'Ga': 4.0}	10	8.14	170.68	97	167	0.00	2.27	7.04
mp-19880	{'Fe': 2.0, 'Te': 4.0}	6	8.05	128.26	74	94	0.12	2.27	7.03
mp-400	{'Nd': 2.0, 'Al': 4.0}	6	5.06	130.13	48	71	0.00	1.87	7.03
mp-1357	{'P': 12.0, 'Rh': 4.0}	16	4.97	261.96	96	151	0.00	2.17	7.03
mp-1008826	{'Os': 1.0, 'N': 2.0}	3	12.51	28.96	76	390	0.00	2.33	7.03
mp-1002221	{'Er': 1.0, 'H': 1.0}	2	9.67	28.91	38	61	0.00	1.79	7.02
mp-8881	{'Al': 2.0, 'As': 2.0}	4	3.59	94.24	39	67	1.69	2.03	7.02
mp-510403	{'Gd': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	7.42	62.44	33	41	0.00	1.96	7.01
mp-976025	{'Li': 3.0, 'Ga': 1.0}	4	2.32	64.68	30	21	0.00	1.69	7.00
mp-1471	{'Zr': 3.0, 'Al': 1.0}	4	5.91	84.42	55	101	0.00	2.27	6.99
mp-971682	{'Si': 12.0, 'N': 8.0}	20	2.48	300.81	72	140	0.12	1.92	6.99
mp-1009537	{'Os': 1.0, 'C': 1.0}	2	17.11	19.63	67	376	0.00	2.27	6.99
mp-865385	{'V': 3.0, 'Re': 1.0}	4	10.27	54.81	70	236	0.00	2.23	6.97
mp-1249	{'Mg': 2.0, 'F': 4.0}	6	3.03	68.19	52	95	6.83	2.05	6.96
mp-2367	{'La': 1.0, 'C': 2.0}	3	5.29	51.10	34	92	0.00	1.74	6.96
mp-1001825	{'Li': 2.0, 'Be': 2.0}	4	1.19	44.60	26	32	0.00	1.72	6.95
mp-2082	{'P': 1.0, 'Ir': 2.0}	3	15.75	43.80	72	318	0.00	2.28	6.95
mp-2661	{'Sr': 2.0, 'Si': 2.0}	4	3.45	111.32	33	49	0.00	1.86	6.94
mp-2583	{'Ti': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	8.32	30.09	49	190	0.00	2.30	6.94
mp-766454	{'Ti': 3.0, 'O': 6.0}	9	3.91	101.81	65	155	2.23	2.00	6.93
mp-11536	{'Np': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	14.07	64.43	76	210	0.00	2.25	6.92
mp-1785	{'Pr': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	6.51	67.03	32	55	0.00	2.03	6.92
mp-28793	{'Mg': 4.0, 'C': 6.0}	10	2.20	127.68	46	91	1.70	1.73	6.91
mp-567885	{'C': 6.0, 'N': 8.0}	14	2.18	140.30	63	77	1.43	1.88	6.91
mp-978546	{'Sc': 3.0, 'Sb': 1.0}	4	4.63	91.94	41	68	0.00	1.99	6.90
mp-24152	{'Ho': 1.0, 'H': 2.0}	3	8.07	34.37	43	88	0.00	1.75	6.90
mp-11385	{'Y': 1.0, 'Fe': 5.0}	6	7.11	86.01	68	105	0.00	2.10	6.90
mp-11220	{'Sc': 4.0, 'Al': 2.0}	6	3.02	128.37	44	70	0.00	2.01	6.90
mp-19800	{'Fe': 11.0, 'Si': 5.0}	16	7.25	172.82	109	218	0.00	2.06	6.90
mp-2297	{'Nd': 1.0, 'C': 2.0}	3	5.85	47.76	35	100	0.00	1.72	6.88
mp-11407	{'Ga': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.68	61.52	79	217	0.00	2.19	6.87
mp-12693	{'Mg': 2.0, 'Rh': 1.0}	3	4.84	51.95	40	65	0.00	2.03	6.86
mp-20438	{'Pu': 1.0, 'Te': 1.0}	2	11.21	55.06	38	75	0.00	1.97	6.86
mp-1001827	{'Ir': 1.0, 'C': 1.0}	2	15.74	21.54	60	333	0.00	2.19	6.86
mp-1132	{'Cd': 1.0, 'O': 1.0}	2	7.79	27.37	45	126	0.00	2.18	6.86
mp-20928	{'Sb': 4.0, 'Ru': 2.0}	6	8.74	130.97	77	116	0.09	2.33	6.85

mp-2358	{'Sm': 2.0, 'Al': 4.0}	6	5.35	126.95	49	74	0.00	1.89	6.85
mp-2403	{'Y': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	15.89	70.46	71	172	0.00	2.13	6.85
mp-21391	{'In': 1.0, 'As': 1.0}	2	6.61	47.64	38	64	0.00	2.18	6.84
mp-2351	{'Tm': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	18.26	68.57	75	178	0.00	2.13	6.84
mp-570287	{'Ta': 10.0, 'Si': 6.0}	16	12.79	256.83	114	211	0.00	1.98	6.83
mp-1761	{'Lu': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	17.49	106.21	92	204	0.00	2.20	6.83
mp-866186	{'Ti': 3.0, 'Zn': 1.0}	4	5.35	64.88	54	111	0.00	2.23	6.83
mp-248	{'Fe': 6.0, 'N': 3.0}	9	7.41	84.50	89	244	0.00	2.10	6.82
mp-1969	{'Nb': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	8.05	138.86	69	97	0.00	2.23	6.82
mp-30671	{'Ti': 4.0, 'Ga': 2.0}	6	5.65	97.26	63	121	0.00	2.16	6.82
mp-977997	{'Zn': 1.0, 'Mo': 3.0}	4	9.57	61.31	64	239	0.00	2.20	6.81
mp-1334	{'Y': 2.0, 'C': 1.0}	3	4.54	69.49	32	61	0.00	1.84	6.81
mp-21255	{'Fe': 4.0, 'Ge': 4.0}	8	8.38	101.89	84	154	0.10	2.13	6.80
mp-22240	{'Mn': 4.0, 'As': 4.0}	8	7.51	114.79	79	114	0.00	2.12	6.78
mp-9967	{'Nd': 4.0, 'Si': 4.0}	8	5.93	193.09	53	75	0.00	1.82	6.77
mp-977585	{'Zr': 3.0, 'Tl': 1.0}	4	8.76	90.59	60	121	0.00	2.26	6.76
mp-2758	{'Sr': 1.0, 'Se': 1.0}	2	4.42	62.63	27	41	2.29	1.97	6.76
mp-10027	{'Ti': 2.0, 'Se': 2.0}	4	5.92	71.09	52	84	0.00	2.16	6.75
mp-20512	{'Fe': 2.0, 'Sn': 2.0}	4	7.84	73.93	60	84	0.00	2.24	6.75
mp-1718	{'Zr': 2.0, 'Fe': 4.0}	6	7.69	87.60	72	147	0.00	2.19	6.75
mp-11228	{'Y': 2.0, 'Al': 2.0}	4	3.88	99.20	35	60	0.00	1.89	6.75
mp-978501	{'Si': 3.0, 'Se': 1.0}	4	4.11	65.90	41	97	0.00	1.97	6.73
mp-977273	{'Mg': 1.0, 'Rh': 5.0}	6	10.19	87.78	85	198	0.00	2.30	6.73
mp-20263	{'Ca': 1.0, 'In': 1.0}	2	4.46	57.70	28	85	0.00	2.02	6.73
mp-2078	{'Ti': 2.0, 'Cu': 2.0}	4	6.44	57.45	62	130	0.00	2.32	6.72
mp-890	{'Nd': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	15.40	114.04	77	180	0.00	2.04	6.72
mp-503	{'Th': 1.0, 'S': 1.0}	2	9.38	46.77	35	116	0.00	1.91	6.72
mp-569594	{'Fe': 7.0, 'Mo': 6.0}	13	9.61	166.94	112	251	0.00	2.19	6.71
mp-12764	{'Sm': 1.0, 'C': 2.0}	3	6.36	45.53	36	103	0.00	1.73	6.70
mp-7851	{'Ta': 3.0, 'Co': 9.0}	12	12.35	144.32	125	247	0.00	2.26	6.70
mp-864655	{'Pa': 1.0, 'Co': 3.0}	4	12.30	55.05	69	173	0.00	2.15	6.70
mp-1008820	{'Pd': 1.0, 'N': 2.0}	3	7.26	30.75	57	219	0.00	2.24	6.70
mp-1014229	{'Ti': 2.0, 'Zn': 1.0}	3	5.46	48.99	47	96	0.00	2.23	6.69
mp-22072	{'Yb': 4.0, 'F': 12.0}	16	7.93	192.62	119	83	0.00	2.17	6.68
mp-1007906	{'Er': 2.0, 'H': 2.0}	4	9.27	60.32	49	67	0.00	1.79	6.68
mp-985	{'Tm': 1.0, 'Cu': 1.0}	2	9.69	39.83	43	76	0.00	2.14	6.67
mp-1383	{'U': 2.0, 'Co': 4.0}	6	14.30	82.63	86	230	0.00	2.14	6.67
mp-1038715	{'Ce': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	5.43	50.28	30	27	0.00	1.94	6.67
mp-2163	{'Ho': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	11.16	39.85	43	120	0.00	2.09	6.67
mp-541	{'Ta': 6.0, 'Sb': 2.0}	8	14.80	149.13	84	185	0.00	2.00	6.67
mp-510536	{'Mo': 4.0, 'O': 8.0}	12	5.80	146.45	89	219	0.47	2.14	6.67
mp-975439	{'Mn': 3.0, 'S': 1.0}	4	7.13	45.82	52	165	0.00	1.95	6.66
mp-982596	{'Tb': 1.0, 'Sc': 1.0}	2	5.92	57.19	28	45	0.00	1.86	6.66
mp-574	{'Ta': 4.0, 'Co': 2.0}	6	14.93	93.60	79	222	0.00	2.04	6.65
mp-2056	{'Ni': 3.0, 'Se': 2.0}	5	7.31	75.92	47	105	0.00	1.73	6.65
mp-7859	{'Zr': 2.0, 'S': 2.0}	4	5.64	72.64	44	119	0.00	1.97	6.65
mp-568789	{'Ti': 2.0, 'Se': 2.0}	4	6.08	69.25	52	84	0.00	2.15	6.64
mp-2781	{'Sc': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	6.87	36.57	38	114	0.00	2.12	6.64
mp-2741	{'Ca': 1.0, 'F': 2.0}	3	3.09	41.96	38	77	7.25	2.15	6.64
mp-20552	{'Cr': 4.0, 'As': 2.0}	6	7.41	80.20	70	165	0.00	2.16	6.63
mp-10212	{'Sc': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	5.64	111.96	56	81	0.00	2.05	6.63

mp-2674	{'Y': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	13.90	114.45	73	162	0.00	2.02	6.62
mp-1682	{'Zr': 4.0, 'As': 4.0}	8	6.65	165.94	65	118	0.00	2.05	6.62
mp-9981	{'Mn': 8.0, 'N': 4.0}	12	6.99	117.76	99	198	0.00	2.14	6.62
mp-862	{'Ca': 2.0, 'Si': 4.0}	6	2.59	123.19	38	60	0.00	1.90	6.62
mp-2119	{'Tb': 1.0, 'C': 2.0}	3	7.13	42.58	37	106	0.00	1.71	6.61
mp-999503	{'Mo': 2.0, 'N': 2.0}	4	7.62	47.95	57	262	0.00	2.09	6.61
mp-449	{'Fe': 10.0, 'Si': 6.0}	16	6.63	182.10	103	185	0.00	2.08	6.58
mp-510198	{'Ir': 2.0, 'Pb': 2.0}	4	15.31	86.62	63	131	0.00	2.07	6.58
mp-27164	{'Fe': 6.0, 'P': 24.0}	30	4.12	434.92	112	138	1.07	2.09	6.57
mp-427	{'Fe': 4.0, 'As': 4.0}	8	8.09	107.31	81	163	0.00	2.15	6.57
mp-11364	{'Ti': 1.0, 'Cu': 1.0}	2	6.35	29.14	44	128	0.00	2.32	6.56
mp-173	{'Mn': 2.0, 'Al': 12.0}	14	3.35	214.78	67	104	0.00	1.96	6.56
mp-2509	{'Th': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	12.68	70.83	70	166	0.00	2.27	6.55
mp-1189	{'Pr': 2.0, 'Al': 4.0}	6	4.89	132.38	46	69	0.00	1.90	6.54
mp-672371	{'Ni': 6.0, 'Sb': 2.0}	8	9.62	102.78	49	165	0.00	1.31	6.54
mp-1483	{'Si': 4.0, 'Rh': 4.0}	8	8.22	105.79	83	221	0.00	2.18	6.53
mp-755066	{'Al': 8.0, 'O': 12.0}	20	3.47	194.96	83	182	4.24	1.90	6.52
mp-540	{'Sc': 2.0, 'Fe': 4.0}	6	6.15	84.59	65	128	0.00	2.17	6.52
mp-2812	{'Ho': 1.0, 'Fe': 5.0}	6	8.68	84.97	68	100	0.00	2.05	6.52
mp-1594	{'Ni': 4.0, 'Ge': 2.0}	6	8.90	70.89	44	177	0.00	1.36	6.51
mp-21149	{'Gd': 2.0, 'O': 4.0}	6	8.54	73.57	71	132	0.00	2.09	6.51
mp-29131	{'V': 2.0, 'Se': 2.0}	4	6.06	71.21	51	82	0.00	2.15	6.51
mp-776911	{'Mg': 4.0, 'O': 4.0}	8	2.73	98.21	48	115	3.43	1.89	6.49
mp-27148	{'Be': 8.0, 'P': 16.0}	24	2.48	380.83	73	89	0.86	1.90	6.46
mp-929	{'Zr': 2.0, 'Co': 4.0}	6	8.42	82.45	76	164	0.00	2.25	6.46
mp-790	{'Lu': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	18.62	67.81	75	184	0.00	2.18	6.46
mp-13683	{'Hf': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	9.87	108.94	71	113	0.00	2.15	6.45
mp-865900	{'Ti': 3.0, 'Tl': 1.0}	4	7.84	73.70	58	110	0.00	2.24	6.45
mp-1606	{'Nb': 1.0, 'Au': 2.0}	3	15.18	53.24	64	175	0.00	2.25	6.45
mp-976106	{'Hf': 3.0, 'Tl': 1.0}	4	13.79	89.06	57	99	0.00	2.00	6.44
mp-2567	{'V': 6.0, 'Si': 2.0}	8	5.78	103.98	74	196	0.00	2.20	6.42
mp-2363	{'Hf': 2.0, 'Mo': 4.0}	6	11.27	109.10	68	200	0.00	2.04	6.42
mp-195	{'Ho': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.91	69.54	70	175	0.00	2.11	6.42
mp-2663	{'Nb': 6.0, 'Pt': 2.0}	8	11.15	141.12	80	207	0.00	2.09	6.41
mp-20351	{'In': 1.0, 'P': 1.0}	2	4.58	52.84	31	59	0.47	2.16	6.41
mp-11565	{'Y': 1.0, 'Rh': 5.0}	6	9.68	103.51	76	178	0.00	2.27	6.41
mp-1898	{'Ce': 2.0, 'Si': 4.0}	6	5.50	118.61	47	92	0.00	1.87	6.41
mp-266	{'Zr': 2.0, 'Pd': 1.0}	3	7.85	61.14	49	123	0.00	2.23	6.40
mp-736	{'Li': 6.0, 'P': 2.0}	8	1.46	117.64	34	40	0.92	1.73	6.39
mp-15661	{'Sc': 8.0, 'C': 6.0}	14	3.80	188.68	66	112	0.47	1.87	6.39
mp-571352	{'Tm': 1.0, 'B': 6.0}	7	5.71	67.96	48	170	0.00	1.56	6.38
mp-20695	{'Zr': 3.0, 'In': 1.0}	4	7.18	89.82	51	97	0.00	2.17	6.37
mp-978303	{'Mg': 3.0, 'Re': 1.0}	4	6.00	71.72	44	115	0.00	1.98	6.36
mp-1823	{'Ti': 6.0, 'Al': 2.0}	8	4.25	133.33	61	115	0.00	2.14	6.36
mp-30764	{'Li': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	12.75	103.46	70	136	0.00	2.01	6.36
mp-22461	{'Fe': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	8.54	55.68	59	119	0.00	2.15	6.35
mp-723	{'Cr': 23.0, 'C': 6.0}	29	7.17	293.75	138	291	0.00	2.09	6.34
mp-2286	{'Li': 2.0, 'Se': 1.0}	3	2.83	54.54	27	34	3.11	1.79	6.34
mp-1555	{'V': 6.0, 'Sb': 2.0}	8	7.59	120.19	79	178	0.00	2.22	6.33
mp-976273	{'Hf': 6.0, 'Ge': 4.0}	10	11.90	190.06	84	129	0.00	2.00	6.33
mp-31219	{'Si': 6.0, 'W': 10.0}	16	14.26	233.69	121	267	0.00	2.07	6.33

mp-712	{'Y': 1.0, 'Cu': 1.0}	2	6.01	42.11	35	70	0.00	2.15	6.31
mp-974565	{'Re': 1.0, 'P': 3.0}	4	8.53	54.35	55	204	0.00	2.06	6.30
mp-1566	{'Sm': 1.0, 'Fe': 5.0}	6	8.06	88.47	63	109	0.00	2.03	6.29
mp-980646	{'Tm': 1.0, 'Si': 3.0}	4	6.08	69.18	40	90	0.00	1.82	6.29
mp-545512	{'Ca': 2.0, 'O': 2.0}	4	2.78	67.01	35	87	3.12	2.01	6.28
mp-978009	{'Hg': 1.0, 'Os': 1.0}	2	18.74	34.64	59	193	0.00	2.32	6.26
mp-2360	{'Ca': 2.0, 'Ge': 2.0}	4	3.73	100.40	33	46	0.00	1.89	6.26
mp-555483	{'Si': 4.0, 'O': 8.0}	12	2.37	168.32	54	133	5.59	1.95	6.26
mp-1743	{'Mo': 5.0, 'As': 4.0}	9	8.35	154.94	81	145	0.00	2.18	6.26
mp-978498	{'Sc': 3.0, 'Al': 1.0}	4	3.09	86.93	36	52	0.00	2.07	6.25
mp-974616	{'Pt': 3.0, 'Rh': 1.0}	4	18.58	61.52	76	223	0.00	2.20	6.25
mp-570428	{'Sc': 3.0, 'In': 1.0}	4	4.45	93.14	38	62	0.00	2.00	6.25
mp-23870	{'Na': 1.0, 'H': 1.0}	2	1.42	28.12	19	22	4.07	1.81	6.24
mp-16718	{'Al': 12.0, 'Tc': 2.0}	14	3.79	227.49	68	107	0.00	1.99	6.24
mp-20272	{'Gd': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.26	71.45	68	161	0.00	2.12	6.24
mp-755089	{'Zr': 4.0, 'O': 8.0}	12	5.50	148.70	77	152	3.96	2.02	6.24
mp-974395	{'Pt': 3.0, 'Rh': 1.0}	4	18.59	61.49	76	211	0.00	2.20	6.24
mp-1002124	{'Hf': 1.0, 'C': 1.0}	2	9.87	32.06	32	163	0.58	1.71	6.23
mp-755759	{'Zr': 4.0, 'O': 8.0}	12	5.82	140.72	80	213	3.25	2.04	6.22
mp-30845	{'Sm': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	16.81	72.66	67	161	0.00	2.12	6.22
mp-1519	{'Ca': 1.0, 'Te': 1.0}	2	4.25	65.45	24	36	1.60	1.91	6.22
mp-865939	{'Li': 1.0, 'Mg': 2.0}	3	1.47	62.55	22	30	0.00	1.88	6.21
mp-1232	{'Mo': 6.0, 'Pt': 2.0}	8	12.67	126.62	85	266	0.00	2.12	6.20
mp-946	{'Pr': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	15.13	115.33	74	172	0.00	2.07	6.20
mp-30180	{'Al': 12.0, 'Mo': 3.0}	15	4.18	242.86	74	111	0.00	2.03	6.20
mp-973884	{'Ni': 3.0, 'Hg': 1.0}	4	11.91	52.52	44	166	0.00	1.57	6.20
mp-1039147	{'Ca': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	3.45	50.80	24	57	0.00	1.95	6.20
mp-28266	{'P': 4.0, 'Pd': 2.0}	6	5.43	102.95	58	109	0.41	2.17	6.19
mp-1025044	{'Al': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	6.95	69.00	40	185	0.00	1.38	6.19
mp-985579	{'Al': 1.0, 'Fe': 2.0}	3	6.09	37.79	44	147	0.00	2.08	6.19
mp-1194	{'Cd': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	14.47	35.28	48	137	0.00	2.16	6.19
mp-31184	{'Al': 2.0, 'Fe': 4.0}	6	6.12	75.28	60	117	0.00	2.06	6.19
mp-11411	{'Sc': 2.0, 'Ga': 2.0}	4	4.71	80.94	42	76	0.00	2.09	6.18
mp-7821	{'V': 2.0, 'Sb': 2.0}	4	6.91	82.99	51	102	0.00	2.20	6.18
mp-1697	{'Tb': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	15.93	114.48	72	157	0.00	2.00	6.18
mp-11309	{'Nb': 1.0, 'Cd': 3.0}	4	8.86	80.61	45	107	0.00	1.89	6.16
mp-2839	{'Ce': 1.0, 'C': 2.0}	3	6.08	44.86	34	101	0.00	1.75	6.15
mp-30875	{'Ti': 4.0, 'Sn': 2.0}	6	6.45	110.39	60	115	0.05	2.17	6.15
mp-1127	{'Sm': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	15.32	117.15	69	154	0.00	1.97	6.15
mp-999395	{'Nb': 3.0, 'Fe': 1.0}	4	8.56	64.90	54	173	0.00	2.11	6.15
mp-755453	{'Mn': 4.0, 'P': 16.0}	20	3.95	300.76	86	130	0.00	2.08	6.15
mp-480	{'Er': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	16.43	112.66	72	173	0.00	1.99	6.14
mp-2271	{'Na': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	12.55	109.32	68	124	0.00	2.02	6.13
mp-20111	{'Eu': 2.0, 'Al': 4.0}	6	4.99	137.08	43	61	0.00	1.86	6.13
mp-20536	{'Co': 3.0, 'Sn': 3.0}	6	8.56	103.42	72	127	0.00	2.28	6.12
mp-981547	{'Pr': 1.0, 'H': 3.0}	4	5.81	41.16	42	84	0.29	1.77	6.11
mp-559	{'Y': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	9.55	70.97	56	126	0.00	2.14	6.10
mp-32570	{'Al': 16.0, 'O': 24.0}	40	3.58	378.82	111	197	4.13	1.91	6.10
mp-636056	{'K': 2.0, 'N': 6.0}	8	1.05	256.36	31	8	0.00	1.99	6.10
mp-568121	{'Mn': 16.0, 'Si': 28.0}	44	5.26	525.77	134	193	0.81	2.00	6.09
mp-2352	{'Na': 2.0, 'O': 1.0}	3	2.35	43.79	30	46	2.04	2.02	6.09

mp-1727	{'Sr': 2.0, 'Si': 4.0}	6	3.47	137.52	39	54	0.00	1.90	6.08
mp-232	{'Dy': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	10.92	40.36	41	115	0.00	2.12	6.08
mp-19905	{'Co': 8.0, 'Si': 4.0}	12	7.59	127.78	107	225	0.00	2.33	6.07
mp-215	{'Y': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	5.83	60.02	29	46	0.00	2.03	6.07
mp-981384	{'Sc': 1.0, 'Os': 3.0}	4	16.50	61.97	76	257	0.00	2.30	6.06
mp-13155	{'Hf': 2.0, 'Ag': 1.0}	3	12.35	62.48	53	111	0.00	2.18	6.06
mp-1014261	{'Ir': 2.0, 'O': 4.0}	6	9.88	75.35	77	188	0.00	2.23	6.05
mp-2434	{'Sr': 1.0, 'Tl': 1.0}	2	6.95	69.77	31	106	0.00	2.12	6.05
mp-1211	{'Sc': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	5.86	44.62	30	67	0.00	2.00	6.05
mp-841	{'Li': 4.0, 'O': 4.0}	8	2.26	67.48	50	71	2.02	1.97	6.04
mp-971631	{'Ga': 1.0, 'P': 1.0}	2	4.84	34.55	33	75	0.00	2.15	6.04
mp-10564	{'Sr': 1.0, 'N': 2.0}	3	4.09	46.95	35	59	0.00	2.01	6.03
mp-2049	{'Zr': 2.0, 'Mo': 4.0}	6	8.47	111.00	59	192	0.00	2.05	6.02
mp-1008650	{'Ce': 1.0, 'Se': 1.0}	2	7.50	48.53	32	44	0.00	1.99	6.01
mp-2187	{'Ti': 2.0, 'Sb': 2.0}	4	6.34	88.80	45	89	0.00	2.11	6.00
mp-2516	{'Y': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	5.56	46.09	29	60	0.00	1.99	6.00
mp-396	{'Yb': 1.0, 'Ga': 1.0}	2	8.56	47.07	33	48	0.00	1.96	6.00
mp-865786	{'Cr': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.27	60.03	65	155	0.00	2.29	5.99
mp-27488	{'Ta': 6.0, 'N': 10.0}	16	9.75	208.84	99	241	1.26	1.98	5.99
mp-1009770	{'Ru': 1.0, 'N': 1.0}	2	8.04	23.77	44	233	0.00	2.23	5.99
mp-22510	{'Fe': 4.0, 'Ge': 4.0}	8	7.72	110.54	76	136	0.00	2.17	5.99
mp-568006	{'Dy': 1.0, 'Fe': 5.0}	6	8.55	85.81	65	86	0.00	2.08	5.98
mp-754812	{'Al': 4.0, 'O': 6.0}	10	2.97	114.12	52	130	4.40	1.88	5.98
mp-2557	{'Zr': 4.0, 'Al': 2.0}	6	5.60	124.31	53	103	0.00	2.12	5.98
mp-973022	{'Sc': 1.0, 'Ru': 3.0}	4	9.46	61.13	65	181	0.00	2.35	5.98
mp-610	{'Mn': 2.0, 'As': 2.0}	4	6.77	63.73	51	57	0.00	2.13	5.98
mp-819	{'Hf': 2.0, 'Cr': 4.0}	6	10.51	89.28	68	191	0.00	2.08	5.97
mp-682	{'Na': 1.0, 'F': 1.0}	2	2.69	25.89	30	48	6.10	2.20	5.97
mp-11500	{'Mn': 1.0, 'Ni': 1.0}	2	7.61	24.80	28	73	0.00	1.59	5.96
mp-973229	{'Sc': 1.0, 'Nb': 1.0}	2	5.55	41.28	32	93	0.00	2.12	5.96
mp-2744	{'Li': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	6.61	28.48	33	79	0.00	1.95	5.96
mp-892	{'Sc': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	11.01	36.22	40	136	0.00	2.07	5.96
mp-11382	{'Nd': 1.0, 'Fe': 5.0}	6	7.78	90.41	59	108	0.00	2.01	5.95
mp-814	{'Dy': 1.0, 'Se': 1.0}	2	8.37	47.90	30	82	0.00	1.86	5.95
mp-582	{'Ce': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	15.70	110.99	72	258	0.00	2.05	5.94
mp-1955	{'Er': 1.0, 'Cu': 1.0}	2	9.46	40.50	39	79	0.00	2.13	5.94
mp-9968	{'Pr': 4.0, 'Si': 4.0}	8	5.68	197.64	50	77	0.00	1.89	5.94
mp-1696	{'Cd': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	10.31	35.25	42	110	0.00	2.16	5.94
mp-30682	{'Zr': 4.0, 'Ga': 4.0}	8	6.86	155.91	73	114	0.00	2.29	5.94
mp-2465	{'Dy': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.73	70.02	66	172	0.00	2.11	5.93
mp-30620	{'Dy': 1.0, 'Rh': 5.0}	6	10.90	103.17	73	188	0.00	2.23	5.93
mp-754434	{'Hf': 3.0, 'N': 4.0}	7	11.60	84.67	68	214	1.16	1.87	5.93
mp-1009548	{'Pd': 1.0, 'N': 1.0}	2	9.12	21.92	46	188	0.00	2.22	5.92
mp-754759	{'Y': 4.0, 'O': 6.0}	10	5.01	149.70	62	138	4.46	1.98	5.91
mp-11562	{'Tb': 1.0, 'Rh': 5.0}	6	10.80	103.53	73	188	0.00	2.23	5.91
mp-12772	{'Hf': 4.0, 'Al': 2.0}	6	10.40	122.66	56	113	0.00	1.91	5.90
mp-22508	{'Y': 1.0, 'Mn': 12.0}	13	7.70	161.41	88	151	0.00	2.05	5.90
mp-2104	{'U': 1.0, 'As': 1.0}	2	10.71	48.53	33	90	0.00	1.90	5.89
mp-978304	{'Mg': 3.0, 'Ta': 1.0}	4	5.31	79.46	40	64	0.00	1.99	5.89
mp-548	{'Nb': 2.0, 'Cr': 4.0}	6	7.77	84.18	64	228	0.00	2.15	5.88
mp-2301	{'Ni': 4.0, 'P': 12.0}	16	4.21	239.48	75	115	0.00	2.03	5.88

mp-1638	{'Sr': 2.0, 'Al': 4.0}	6	3.30	142.39	37	48	0.00	1.89	5.87
mp-33029	{'Nd': 2.0, 'O': 3.0}	5	6.13	91.19	46	111	1.36	1.97	5.87
mp-1285	{'Pt': 2.0, 'O': 4.0}	6	11.25	67.04	87	204	0.66	2.34	5.87
mp-684709	{'K': 6.0, 'B': 34.0}	40	2.20	454.61	77	96	0.00	1.69	5.87
mp-2693	{'Sn': 1.0, 'Se': 1.0}	2	5.88	55.78	29	50	0.82	2.04	5.86
mp-2092	{'Ce': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.53	72.42	57	129	0.00	2.17	5.86
mp-1018154	{'Hf': 2.0, 'Hg': 1.0}	3	14.05	65.92	49	99	0.00	2.05	5.86
mp-1019	{'Y': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	7.42	92.34	47	121	0.00	1.73	5.85
mp-370	{'Cd': 1.0, 'S': 1.0}	2	5.75	41.74	34	73	0.37	2.20	5.84
mp-15965	{'Hf': 10.0, 'Si': 6.0}	16	10.92	297.13	88	141	0.00	1.88	5.84
mp-2715	{'Co': 4.0, 'As': 8.0}	12	7.36	188.46	89	132	0.17	2.22	5.83
mp-567305	{'Ce': 2.0, 'Al': 6.0}	8	4.44	165.37	49	61	0.00	1.93	5.83
mp-2697	{'Sr': 1.0, 'O': 2.0}	3	4.56	43.54	38	71	2.91	2.09	5.83
mp-1500	{'Ba': 1.0, 'S': 1.0}	2	4.18	67.31	25	41	2.21	2.05	5.83
mp-2694	{'La': 2.0, 'Al': 4.0}	6	4.74	135.00	42	55	0.00	1.89	5.83
mp-2065	{'Mn': 2.0, 'S': 2.0}	4	4.30	67.26	39	56	0.00	2.01	5.82
mp-1009755	{'Ca': 2.0, 'Ge': 1.0}	3	2.70	94.07	24	24	0.70	1.90	5.82
mp-2489	{'U': 1.0, 'C': 1.0}	2	13.80	30.09	36	188	0.00	1.77	5.82
mp-1128	{'Si': 4.0, 'Ir': 4.0}	8	12.71	115.12	87	215	0.00	2.18	5.81
mp-13032	{'Mg': 1.0, 'S': 1.0}	2	2.02	46.25	19	55	3.58	1.90	5.81
mp-846	{'Hf': 4.0, 'Al': 6.0}	10	7.97	182.43	67	114	0.00	1.94	5.81
mp-974341	{'Ru': 2.0, 'Rh': 6.0}	8	11.99	113.55	105	242	0.00	2.48	5.81
mp-571193	{'Mn': 8.0, 'P': 32.0}	40	4.08	582.12	115	137	0.56	2.07	5.81
mp-865193	{'Co': 6.0, 'Pt': 2.0}	8	12.66	97.53	91	212	0.00	2.19	5.80
mp-571271	{'Tm': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	16.57	112.03	72	170	0.00	2.04	5.79
mp-10651	{'Yb': 2.0, 'Si': 2.0}	4	7.14	93.58	38	57	0.00	1.84	5.79
mp-30572	{'Hf': 4.0, 'Ga': 2.0}	6	11.89	119.20	63	119	0.00	2.02	5.78
mp-2619	{'Fe': 2.0, 'Sb': 2.0}	4	8.42	70.07	54	94	0.00	2.19	5.77
mp-9954	{'Hf': 4.0, 'As': 4.0}	8	10.51	160.19	66	127	0.00	1.97	5.76
mp-1014993	{'Cr': 4.0, 'N': 8.0}	12	4.93	107.80	79	207	0.00	2.09	5.76
mp-1007691	{'Hf': 2.0, 'Pt': 2.0}	4	16.39	75.71	56	179	0.00	1.96	5.75
mp-754401	{'Al': 4.0, 'O': 6.0}	10	2.53	133.91	46	95	4.23	1.86	5.75
mp-864984	{'Mn': 1.0, 'V': 3.0}	4	6.85	50.35	54	209	0.00	2.21	5.74
mp-2291	{'Si': 2.0, 'Ni': 1.0}	3	4.72	40.37	32	150	0.00	1.83	5.74
mp-1037	{'Pr': 1.0, 'Pt': 5.0}	6	16.28	113.90	72	177	0.00	2.07	5.74
mp-1903	{'Ba': 1.0, 'Al': 4.0}	5	3.43	118.89	35	51	0.00	1.94	5.74
mp-11561	{'Tb': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	10.62	40.94	38	113	0.00	2.09	5.73
mp-978271	{'Mg': 3.0, 'Al': 1.0}	4	1.98	83.84	27	32	0.00	1.93	5.73
mp-1526	{'Ti': 1.0, 'Hg': 1.0}	2	10.85	38.04	49	104	0.00	2.42	5.73
mp-2747	{'Tb': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	11.20	70.91	57	126	0.00	2.15	5.73
mp-530274	{'Al': 23.0, 'B': 50.0}	73	3.04	633.26	122	186	0.00	1.76	5.73
mp-1549	{'Tb': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.52	70.54	65	173	0.00	2.13	5.72
mp-1013547	{'Ca': 3.0, 'P': 2.0}	5	2.02	149.72	27	40	0.35	1.90	5.72
mp-27705	{'Li': 4.0, 'Si': 2.0}	6	1.39	100.38	26	33	0.00	1.71	5.72
mp-30481	{'Ca': 1.0, 'Pt': 5.0}	6	15.08	111.85	71	166	0.00	2.08	5.72
mp-1327	{'Nd': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	4.77	58.65	23	38	0.00	1.84	5.72
mp-638765	{'Al': 4.0, 'O': 6.0}	10	2.72	124.71	48	78	1.14	1.86	5.71
mp-1001788	{'Zr': 1.0, 'B': 6.0}	7	3.88	66.86	41	179	0.00	1.63	5.70
mp-1453	{'Nd': 1.0, 'Se': 1.0}	2	6.92	53.58	27	73	0.00	1.88	5.69
mp-19870	{'Ga': 1.0, 'Fe': 3.0}	4	8.03	49.05	54	174	0.00	2.13	5.69
mp-19814	{'Ni': 2.0, 'As': 4.0}	6	6.94	99.75	54	114	0.00	2.02	5.68

mp-10025	{'Si': 4.0, 'Ru': 8.0}	12	9.54	160.25	102	257	0.00	2.29	5.68
mp-193	{'Zr': 2.0, 'Cu': 1.0}	3	6.97	58.62	47	109	0.00	2.33	5.68
mp-2480	{'Os': 4.0, 'Se': 8.0}	12	10.62	217.66	106	158	0.58	2.38	5.68
mp-1018029	{'Cu': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	10.27	27.49	46	141	0.00	2.27	5.68
mp-984873	{'Al': 6.0, 'Fe': 2.0}	8	4.15	109.43	53	125	0.00	2.00	5.68
mp-16528	{'Al': 12.0, 'Re': 2.0}	14	5.05	228.87	70	113	0.00	1.99	5.66
mp-2337	{'Hf': 2.0, 'Co': 4.0}	6	12.09	81.41	74	156	0.00	2.16	5.64
mp-972220	{'Ti': 2.0, 'Pt': 6.0}	8	17.05	123.34	92	234	0.00	2.17	5.64
mp-1008987	{'Ir': 1.0, 'N': 1.0}	2	13.66	25.07	49	265	0.00	2.21	5.63
mp-21476	{'Fe': 8.0, 'N': 4.0}	12	7.40	112.84	89	244	0.00	2.11	5.63
mp-15649	{'As': 8.0, 'Ir': 4.0}	12	10.45	217.34	96	152	1.15	2.25	5.62
mp-972742	{'Sm': 1.0, 'Br': 1.0}	2	7.11	53.77	32	44	0.00	2.11	5.62
mp-1147	{'Ti': 6.0, 'O': 10.0}	16	4.19	177.34	76	171	0.00	2.01	5.61
mp-1023128	{'Cu': 1.0, 'S': 1.0}	2	5.47	29.05	40	105	0.00	2.40	5.61
mp-569593	{'Pm': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	4.88	57.61	23	38	0.00	1.84	5.61
mp-1674	{'Pr': 1.0, 'Se': 1.0}	2	6.65	54.94	28	72	0.00	1.98	5.61
mp-862864	{'Pa': 3.0, 'Ge': 1.0}	4	14.08	90.33	51	107	0.00	1.97	5.60
mp-21005	{'Gd': 1.0, 'In': 1.0}	2	8.06	56.06	31	381	0.00	2.07	5.60
mp-11496	{'Lu': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	9.33	42.76	35	68	0.00	2.05	5.59
mp-20214	{'U': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	9.72	76.41	50	85	0.00	2.06	5.59
mp-300	{'Yb': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	18.69	67.39	64	161	0.00	2.08	5.58
mp-1971	{'Ho': 1.0, 'Cu': 1.0}	2	9.25	41.00	37	73	0.00	2.13	5.57
mp-550	{'Al': 12.0, 'Mo': 1.0}	13	3.20	218.10	57	91	0.00	1.99	5.57
mp-1025030	{'Er': 1.0, 'Pt': 5.0}	6	17.18	110.47	72	188	0.00	2.06	5.57
mp-30683	{'Zr': 2.0, 'Ga': 4.0}	6	7.05	108.66	64	100	0.00	2.31	5.55
mp-1664	{'V': 6.0, 'Pd': 2.0}	8	7.71	111.74	74	197	0.00	2.23	5.55
mp-755300	{'Ti': 3.0, 'O': 3.0}	6	4.66	68.25	51	207	0.00	2.05	5.54
mp-570578	{'Zr': 1.0, 'In': 3.0}	4	7.87	91.88	48	72	0.00	2.18	5.53
mp-1190	{'Zn': 1.0, 'Se': 1.0}	2	5.06	47.34	28	58	1.61	2.07	5.53
mp-571651	{'Ti': 4.0, 'Se': 4.0}	8	5.95	141.54	61	105	0.00	2.13	5.53
mp-2720	{'Nd': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	14.89	119.22	64	149	0.00	1.99	5.52
mp-1958	{'Sr': 1.0, 'Te': 1.0}	2	4.70	76.01	23	39	2.04	1.97	5.52
mp-10761	{'Fe': 2.0, 'Te': 2.0}	4	8.22	74.13	51	79	0.00	2.18	5.52
mp-862862	{'Pa': 3.0, 'Sb': 1.0}	4	13.88	97.47	50	106	0.00	1.99	5.51
mp-1401	{'Zr': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	7.23	101.99	59	102	0.00	2.17	5.50
mp-554278	{'Ti': 4.0, 'O': 8.0}	12	3.62	146.71	61	181	2.69	2.01	5.50
mp-7189	{'Al': 4.0, 'Pd': 4.0}	8	7.49	118.28	65	148	0.00	2.07	5.49
mp-24289	{'H': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	10.05	17.74	38	174	0.00	1.89	5.49
mp-583	{'Co': 4.0, 'As': 4.0}	8	8.28	107.41	80	157	0.00	2.29	5.49
mp-992	{'Ca': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	4.25	70.21	31	43	0.00	2.03	5.49
mvc-5096	{'W': 4.0, 'O': 12.0}	16	6.97	220.88	95	50	1.43	2.12	5.49
mp-535	{'Fe': 4.0, 'N': 1.0}	5	7.95	49.58	57	193	0.00	2.03	5.49
mp-622209	{'Al': 12.0, 'Ni': 4.0}	16	4.03	229.90	66	113	0.00	1.92	5.48
mp-1156	{'Ga': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	5.29	60.13	30	45	0.37	2.23	5.48
mp-10904	{'Al': 4.0, 'Pt': 4.0}	8	12.40	118.91	74	184	0.00	2.02	5.47
mp-30336	{'Al': 12.0, 'W': 3.0}	15	5.98	243.22	77	117	0.00	2.04	5.46
mp-741	{'Hf': 4.0, 'O': 8.0}	12	11.60	120.49	94	225	3.39	2.01	5.46
mp-13852	{'Ge': 6.0, 'N': 8.0}	14	5.12	177.60	80	175	1.90	2.15	5.46
mp-505569	{'Ce': 1.0, 'H': 2.0}	3	5.81	40.61	32	67	0.00	1.76	5.45
mp-11413	{'Sc': 2.0, 'Ga': 4.0}	6	5.63	108.75	52	74	0.00	2.13	5.45
mp-1502	{'Al': 2.0, 'Pt': 1.0}	3	7.86	52.63	39	129	0.00	2.01	5.45

mp-387	{'Ce': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	6.73	64.63	27	49	0.00	1.99	5.45
mp-8085	{'Mg': 6.0, 'P': 4.0}	10	2.05	218.65	39	57	1.56	1.92	5.44
mp-2186	{'Np': 1.0, 'As': 1.0}	2	10.51	49.29	32	75	0.00	1.94	5.44
mp-30856	{'Zn': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.72	60.99	68	213	0.00	2.20	5.44
mp-21237	{'Co': 4.0, 'Ge': 4.0}	8	8.17	107.02	82	152	0.00	2.34	5.44
mp-570832	{'Sr': 1.0, 'Pt': 5.0}	6	15.32	115.25	69	161	0.00	2.09	5.44
mp-634751	{'Yb': 1.0, 'H': 2.0}	3	7.38	39.38	34	49	0.12	1.71	5.44
mp-569196	{'Y': 3.0, 'Ni': 9.0}	12	7.60	173.67	52	132	0.00	1.46	5.43
mp-569815	{'Si': 16.0, 'Ru': 8.0}	24	6.12	341.20	108	185	0.48	2.19	5.42
mp-1447	{'Sm': 1.0, 'Se': 1.0}	2	7.40	51.44	27	73	0.00	1.89	5.42
mp-23241	{'Y': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	7.76	63.74	30	54	0.00	2.08	5.42
mp-21200	{'Pu': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	10.19	62.48	45	14	0.00	2.05	5.40
mp-30338	{'Y': 3.0, 'Al': 1.0}	4	4.46	109.45	32	49	0.00	1.94	5.40
mp-22318	{'Sr': 2.0, 'Al': 4.0}	6	3.12	150.57	34	45	0.00	1.90	5.39
mp-1009223	{'Na': 1.0, 'As': 1.0}	2	3.94	41.24	25	43	0.00	2.00	5.38
mp-21276	{'Pb': 1.0, 'S': 1.0}	2	7.33	54.17	29	52	0.99	2.01	5.38
mp-546794	{'Si': 2.0, 'O': 4.0}	6	2.12	94.26	34	27	5.85	1.91	5.38
mp-2794	{'Fe': 10.0, 'C': 4.0}	14	7.79	129.33	90	233	0.00	2.04	5.37
mp-1009819	{'Sr': 1.0, 'O': 1.0}	2	5.55	31.01	31	170	2.79	2.10	5.34
mp-10692	{'Co': 4.0, 'Ge': 4.0}	8	8.75	99.91	76	157	0.00	2.19	5.34
mp-567841	{'Be': 24.0, 'P': 16.0}	40	2.23	529.50	72	92	0.89	1.72	5.34
mp-2254	{'Al': 16.0, 'O': 24.0}	40	3.66	370.29	103	201	4.83	1.91	5.34
mp-29772	{'Y': 2.0, 'Ge': 6.0}	8	6.06	168.03	52	73	0.00	1.97	5.34
mp-1009008	{'La': 1.0, 'Te': 1.0}	2	7.26	60.98	28	51	0.00	2.01	5.33
mp-30849	{'Ta': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	19.20	98.77	78	243	0.00	2.14	5.33
mp-568901	{'Nb': 4.0, 'Fe': 8.0}	12	8.77	154.95	87	196	0.00	2.14	5.32
mp-1641	{'Cr': 2.0, 'Sb': 2.0}	4	7.01	82.34	47	72	0.00	2.21	5.32
mp-886	{'Ga': 4.0, 'O': 6.0}	10	5.68	109.59	69	155	2.04	2.08	5.31
mp-2133	{'Zn': 2.0, 'O': 2.0}	4	5.44	49.72	41	130	0.73	1.99	5.31
mp-7250	{'Nb': 6.0, 'Co': 7.0}	13	8.89	181.26	95	213	0.00	2.24	5.30
mp-29771	{'Mg': 2.0, 'C': 4.0}	6	2.06	77.84	29	78	2.64	1.69	5.30
mp-1922	{'Ru': 4.0, 'Se': 8.0}	12	7.93	216.92	93	138	0.48	2.40	5.29
mp-27606	{'Zr': 4.0, 'As': 8.0}	12	6.85	233.84	71	110	0.00	2.09	5.28
mp-1995	{'Pr': 1.0, 'C': 2.0}	3	5.58	49.12	29	92	0.00	1.74	5.28
mp-7083	{'La': 4.0, 'Si': 4.0}	8	5.43	204.11	44	66	0.00	1.85	5.27
mp-1798	{'Ce': 1.0, 'Mg': 3.0}	4	3.51	100.74	29	38	0.00	1.90	5.27
mp-14024	{'Zr': 6.0, 'O': 2.0}	8	6.59	145.93	56	132	0.00	2.02	5.27
mp-20516	{'In': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.44	66.64	64	205	0.00	2.18	5.26
mp-1561	{'Tb': 1.0, 'Se': 1.0}	2	8.12	48.63	27	77	0.00	1.85	5.26
mp-921	{'Y': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	9.01	108.64	62	152	0.00	2.21	5.26
mp-12598	{'Pr': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	16.02	75.25	59	155	0.00	2.13	5.26
mp-615	{'Y': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	3.42	54.98	20	41	0.00	1.87	5.25
mp-1006887	{'Cd': 1.0, 'C': 1.0}	2	7.22	28.63	30	101	0.00	1.90	5.25
mp-2343	{'Mg': 2.0, 'Sn': 1.0}	3	3.51	79.19	26	41	0.00	1.95	5.25
mp-673247	{'Y': 4.0, 'O': 6.0}	10	5.06	148.26	58	136	0.00	1.99	5.25
mp-971744	{'Zn': 1.0, 'Co': 3.0}	4	8.74	46.04	61	178	0.00	2.33	5.25
mp-15651	{'Ni': 3.0, 'Se': 3.0}	6	7.12	96.30	45	104	0.00	1.81	5.25
mp-428	{'Pr': 1.0, 'Mg': 3.0}	4	3.44	103.22	29	36	0.00	1.92	5.25
mp-973060	{'Mg': 1.0, 'Cr': 1.0}	2	3.44	36.79	25	58	0.00	2.07	5.24
mp-23234	{'Tm': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	10.19	61.58	32	55	0.00	2.06	5.23
mp-1018721	{'Hf': 2.0, 'O': 4.0}	6	10.36	67.46	60	207	4.68	1.95	5.21

mp-22866	{'Ho': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	9.89	62.77	32	53	0.00	2.08	5.21
mp-16371	{'Th': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	8.83	141.90	48	83	0.00	1.92	5.20
mp-569671	{'Zr': 4.0, 'Sb': 4.0}	8	7.67	184.41	58	104	0.00	2.08	5.20
mp-1837	{'Tb': 1.0, 'Cu': 1.0}	2	8.76	42.19	34	84	0.00	2.12	5.19
mp-568	{'Ti': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	7.38	131.19	54	89	0.00	2.17	5.19
mp-8883	{'Ga': 2.0, 'As': 2.0}	4	5.05	95.05	40	60	0.19	2.20	5.19
mp-601848	{'Fe': 11.0, 'Co': 5.0}	16	8.11	186.15	98	192	0.00	2.16	5.19
mp-16488	{'Al': 18.0, 'Co': 4.0}	22	3.61	331.97	74	106	0.00	2.00	5.19
mp-862954	{'Pm': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.50	73.41	51	109	0.00	2.13	5.19
mp-1779	{'Yb': 1.0, 'Te': 1.0}	2	7.76	64.33	26	40	1.53	1.90	5.19
mp-1048	{'Ti': 2.0, 'Ni': 2.0}	4	6.41	55.18	38	152	0.00	1.85	5.18
mp-20191	{'Si': 12.0, 'Ru': 8.0}	20	6.77	280.99	98	202	0.38	2.16	5.18
mp-862861	{'Pa': 3.0, 'Si': 1.0}	4	13.61	87.96	46	111	0.00	1.91	5.18
mp-546546	{'Si': 3.0, 'O': 6.0}	9	2.04	146.97	38	83	5.56	1.93	5.18
mp-21078	{'Fe': 6.0, 'Ge': 2.0}	8	8.24	96.79	68	169	0.00	2.08	5.18
mp-972202	{'Tc': 1.0, 'As': 3.0}	4	8.07	66.38	47	138	0.00	2.11	5.18
mp-1018149	{'Sc': 1.0, 'Cu': 2.0}	3	6.25	45.70	44	115	0.00	2.30	5.17
mp-29646	{'Hf': 4.0, 'As': 8.0}	12	9.53	228.76	75	115	0.00	2.02	5.17
mp-23245	{'Er': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	10.04	62.23	32	53	0.00	2.08	5.17
mp-10637	{'Th': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	10.20	57.58	31	89	0.00	2.02	5.16
mp-182	{'Sr': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	4.75	79.30	32	56	0.00	2.13	5.16
mp-11318	{'Ce': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	16.57	72.69	59	162	0.00	2.13	5.16
mp-570632	{'Sc': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	7.67	55.00	30	58	0.00	2.09	5.15
mp-568077	{'Ta': 4.0, 'Fe': 8.0}	12	12.52	155.22	93	228	0.00	2.10	5.15
mp-1025397	{'Ge': 4.0, 'Ru': 4.0}	8	9.83	117.42	80	162	0.17	2.30	5.15
mp-9835	{'Co': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	8.18	122.79	63	98	0.00	2.33	5.15
mp-12678	{'Ta': 4.0, 'Mn': 8.0}	12	12.20	158.34	88	243	0.00	2.04	5.15
mp-1061	{'Pr': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	14.64	120.51	62	146	0.00	2.02	5.14
mp-22921	{'Tb': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	9.53	64.12	31	52	0.00	2.08	5.14
mp-1210	{'Th': 1.0, 'Cd': 2.0}	3	9.78	77.59	36	65	0.00	1.95	5.13
mp-2123	{'Nb': 3.0, 'Au': 2.0}	5	12.33	90.57	61	173	0.00	2.18	5.13
mp-30673	{'Ti': 4.0, 'Ga': 6.0}	10	6.38	158.64	67	91	0.00	2.12	5.13
mp-2677	{'Sc': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	9.33	64.80	52	155	0.00	2.19	5.13
mp-978508	{'Si': 3.0, 'Os': 1.0}	4	8.37	54.45	48	166	0.00	2.08	5.12
mp-865166	{'Hf': 1.0, 'Pd': 5.0}	6	12.28	96.11	70	169	0.00	2.22	5.12
mp-755328	{'Zr': 2.0, 'Sn': 4.0}	6	7.85	139.00	55	87	0.00	2.19	5.12
mp-842	{'Ca': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	12.40	115.21	59	132	0.00	2.02	5.12
mp-1017	{'Zr': 6.0, 'O': 2.0}	8	6.61	145.62	55	134	0.00	2.02	5.11
mp-1751	{'Th': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	9.08	64.73	29	78	0.00	2.03	5.11
mp-1008924	{'Dy': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	8.58	55.02	30	64	0.00	2.04	5.11
mp-15954	{'As': 8.0, 'Rh': 4.0}	12	7.77	216.08	83	139	0.31	2.28	5.10
mp-775808	{'Mg': 6.0, 'O': 6.0}	12	2.73	147.18	49	115	3.41	1.89	5.09
mp-11261	{'Y': 1.0, 'Au': 1.0}	2	10.04	47.26	33	86	0.00	2.07	5.09
mp-1006886	{'Ce': 1.0, 'S': 1.0}	2	6.60	43.34	29	14	0.00	1.98	5.09
mp-1548	{'Pr': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	4.58	59.86	23	35	0.00	1.98	5.09
mp-21484	{'Pu': 1.0, 'Ge': 3.0}	4	9.83	78.01	44	59	0.00	1.96	5.08
mp-1883	{'Sn': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.19	66.07	28	40	0.66	2.15	5.08
mp-10627	{'Sr': 1.0, 'S': 1.0}	2	4.03	49.37	23	137	1.89	2.02	5.08
mp-903	{'Zr': 2.0, 'Cr': 4.0}	6	7.11	91.20	56	181	0.00	2.16	5.08
mp-574283	{'Gd': 1.0, 'Te': 1.0}	2	7.74	61.14	26	75	0.00	1.93	5.07
mp-30850	{'Ta': 2.0, 'Pt': 6.0}	8	19.91	127.81	90	262	0.00	2.18	5.07

mp-915	{'Y': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	6.30	53.04	25	57	0.00	1.92	5.07
mp-603640	{'Ga': 1.0, 'As': 1.0}	2	6.20	38.73	31	67	0.00	2.15	5.06
mp-568748	{'Fe': 2.0, 'B': 1.0}	3	6.65	30.61	40	173	0.00	2.03	5.06
mp-2316	{'Tm': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	8.89	43.78	30	47	0.00	1.95	5.06
mp-861975	{'Pa': 1.0, 'O': 3.0}	4	11.07	41.85	57	251	0.00	2.12	5.06
mp-554201	{'Mo': 1.0, 'F': 3.0}	4	3.43	74.06	36	92	3.30	2.20	5.05
mp-862844	{'Pa': 2.0, 'Al': 6.0}	8	6.59	157.17	50	100	0.00	1.91	5.05
mp-28056	{'P': 2.0, 'Rh': 3.0}	5	8.64	71.21	60	211	0.00	2.28	5.04
mp-11227	{'Al': 12.0, 'W': 1.0}	13	3.86	218.50	57	92	0.00	2.00	5.04
mp-2454	{'Ti': 4.0, 'Fe': 8.0}	12	6.88	153.95	79	147	0.00	2.17	5.04
mp-865430	{'Y': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.04	59.51	25	41	0.00	1.98	5.04
mp-12553	{'Pr': 2.0, 'Al': 6.0}	8	4.27	172.39	43	65	0.00	1.93	5.03
mp-19876	{'In': 3.0, 'Ni': 3.0}	6	8.21	105.26	50	103	0.00	1.96	5.03
mp-6930	{'Si': 3.0, 'O': 6.0}	9	2.48	120.82	44	27	5.67	1.95	5.03
mp-775935	{'Zr': 3.0, 'O': 6.0}	9	4.41	139.16	50	127	3.86	1.97	5.03
mp-1008682	{'Ti': 1.0, 'S': 2.0}	3	3.92	47.49	31	60	0.00	2.04	5.03
mp-7000	{'Si': 3.0, 'O': 6.0}	9	2.49	120.34	44	29	5.68	1.96	5.02
mp-1961	{'Ti': 1.0, 'Ag': 1.0}	2	7.43	34.81	40	101	0.00	2.42	5.02
mp-1640	{'Ho': 2.0, 'C': 1.0}	3	8.41	67.48	32	64	0.00	1.83	5.01
mp-2775	{'Sr': 1.0, 'Al': 4.0}	5	2.90	112.08	30	53	0.00	1.92	5.01
mp-560588	{'Zn': 2.0, 'S': 2.0}	4	4.00	81.02	33	69	2.08	2.02	5.01
mp-2333	{'Nd': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.36	74.30	50	115	0.00	2.14	5.01
mp-1104	{'La': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	4.34	62.39	21	35	0.00	1.90	5.00
mp-7700	{'Si': 1.0, 'B': 6.0}	7	2.19	70.63	31	151	0.29	1.65	5.00
mp-570963	{'Ta': 4.0, 'Cr': 8.0}	12	11.31	167.38	87	243	0.00	2.11	4.99
mp-7192	{'Sc': 4.0, 'Sb': 2.0}	6	5.00	140.60	40	73	0.00	1.98	4.99
mp-569120	{'Nd': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	16.26	74.52	57	156	0.00	2.13	4.99
mp-2513	{'As': 8.0, 'Pt': 4.0}	12	10.27	223.00	83	137	0.29	2.17	4.99
mp-11284	{'Ca': 2.0, 'Ga': 4.0}	6	4.59	129.91	41	47	0.00	2.01	4.98
mp-2451	{'Y': 3.0, 'Al': 9.0}	12	3.60	235.04	50	72	0.00	1.95	4.98
mp-634859	{'Ca': 1.0, 'O': 2.0}	3	3.15	37.99	30	61	2.84	2.04	4.98
mp-753629	{'Zr': 12.0, 'O': 6.0}	18	6.72	294.36	78	153	0.00	1.98	4.98
mp-696	{'Si': 4.0, 'Pt': 4.0}	8	12.06	122.95	70	174	0.00	2.06	4.98
mp-1749	{'Ca': 1.0, 'Al': 4.0}	5	2.31	106.31	28	57	0.00	1.92	4.97
mp-2488	{'Si': 4.0, 'Os': 4.0}	8	13.16	110.18	79	211	0.62	2.16	4.97
mp-10886	{'Al': 3.0, 'Cu': 2.0}	5	4.63	74.60	45	102	0.00	2.17	4.97
mp-22907	{'Dy': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	9.72	63.43	31	53	0.00	2.10	4.97
mp-2334	{'Dy': 1.0, 'Cu': 1.0}	2	9.03	41.59	35	79	0.00	2.19	4.96
mp-2558	{'Sm': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	5.10	56.91	22	44	0.00	1.88	4.96
mp-861979	{'Ir': 4.0, 'S': 6.0}	10	9.57	166.76	86	168	1.15	2.35	4.96
mp-1595	{'Nb': 2.0, 'O': 5.0}	7	4.29	102.95	49	139	2.22	2.12	4.96
mp-832	{'Ho': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	10.54	42.76	32	95	0.00	1.99	4.95
mp-1786	{'Ti': 6.0, 'Au': 2.0}	8	8.46	133.69	71	139	0.00	2.28	4.95
mp-446	{'Cr': 6.0, 'Pt': 2.0}	8	11.40	102.32	70	242	0.00	2.04	4.95
mp-641526	{'Fe': 13.0, 'Co': 3.0}	16	8.04	186.48	92	184	0.00	2.12	4.94
mp-11209	{'Al': 2.0, 'As': 2.0}	4	4.55	74.38	35	83	0.00	2.04	4.94
mp-18773	{'W': 4.0, 'O': 12.0}	16	6.74	228.59	86	59	1.34	2.12	4.94
mp-788	{'Co': 2.0, 'Te': 2.0}	4	8.83	70.19	51	110	0.00	2.25	4.93
mp-1463	{'La': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	14.97	116.11	61	242	0.00	2.03	4.92
mp-30409	{'Mn': 2.0, 'Au': 1.0}	3	10.96	46.50	48	114	0.00	2.21	4.92
mp-10125	{'Sb': 2.0, 'Ir': 2.0}	4	13.03	80.04	59	160	0.00	2.33	4.92

mp-2074	{'Li': 3.0, 'Sb': 1.0}	4	3.35	70.63	27	38	0.81	1.77	4.92
mp-999550	{'Mn': 3.0, 'Ga': 1.0}	4	8.15	47.77	48	132	0.00	2.08	4.92
mp-995	{'Eu': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	15.78	112.87	63	147	0.00	2.03	4.92
mp-11256	{'Sc': 1.0, 'Au': 1.0}	2	10.10	39.78	37	103	0.00	2.21	4.92
mp-566278	{'W': 4.0, 'O': 12.0}	16	6.65	231.49	82	194	1.31	2.12	4.92
mp-969	{'Yb': 2.0, 'Al': 4.0}	6	5.95	126.71	41	55	0.00	1.90	4.91
mp-10632	{'Tl': 1.0, 'S': 1.0}	2	8.45	46.49	32	55	0.00	2.12	4.91
mp-357	{'Sm': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.69	72.98	50	123	0.00	2.15	4.90
mp-1187	{'Th': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	17.83	114.83	67	201	0.00	2.08	4.90
mp-972987	{'Mn': 3.0, 'Tl': 1.0}	4	9.42	65.08	47	54	0.00	2.05	4.90
mp-22905	{'Li': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	2.06	34.20	21	32	6.40	2.09	4.89
mp-1105	{'Ba': 1.0, 'O': 2.0}	3	5.39	52.15	35	67	2.29	2.12	4.89
mp-7954	{'Nd': 2.0, 'O': 3.0}	5	5.28	105.90	38	92	1.58	1.99	4.89
mp-570001	{'Al': 12.0, 'Fe': 2.0}	14	3.43	210.93	56	106	0.00	1.98	4.89
mp-999118	{'Tc': 2.0, 'B': 2.0}	4	8.57	42.17	44	269	0.00	1.90	4.88
mp-20714	{'Fe': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	8.05	123.43	59	87	0.00	2.29	4.88
mp-452	{'Co': 4.0, 'As': 12.0}	16	6.66	282.85	83	116	0.00	2.19	4.88
mp-2500	{'Al': 5.0, 'Cu': 5.0}	10	5.36	140.31	67	113	0.00	2.22	4.87
mp-13061	{'Y': 2.0, 'O': 3.0}	5	5.38	69.71	42	140	4.19	2.00	4.87
mp-756436	{'Fe': 2.0, 'O': 2.0}	4	5.54	43.08	46	140	1.21	2.19	4.86
mp-30865	{'Tm': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	11.73	106.09	61	157	0.00	2.13	4.86
mp-30672	{'Ti': 6.0, 'Ga': 2.0}	8	5.42	130.80	56	118	0.00	2.16	4.85
mp-601842	{'Fe': 9.0, 'Co': 7.0}	16	8.21	185.17	97	190	0.00	2.20	4.85
mp-862259	{'Sc': 6.0, 'Al': 2.0}	8	3.08	174.32	41	64	0.00	2.06	4.84
mp-9568	{'Li': 3.0, 'Ga': 2.0}	5	3.49	76.28	33	35	0.00	1.85	4.84
mp-23300	{'Nd': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	8.47	69.27	28	47	0.00	2.07	4.84
mp-976799	{'Ni': 3.0, 'Bi': 1.0}	4	11.45	55.83	38	136	0.00	1.63	4.83
mp-2070	{'Co': 4.0, 'S': 8.0}	12	4.90	166.96	73	124	0.00	2.28	4.83
mp-1331	{'Y': 1.0, 'Cd': 2.0}	3	6.97	74.71	32	56	0.00	1.99	4.83
mp-10026	{'Sc': 2.0, 'Te': 2.0}	4	5.55	103.23	33	63	0.00	1.97	4.83
mp-542777	{'Ce': 1.0, 'Pt': 5.0}	6	16.55	111.90	64	205	0.00	2.06	4.83
mp-22700	{'V': 3.0, 'Se': 4.0}	7	6.15	126.56	54	80	0.00	2.16	4.82
mp-22873	{'Sm': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	8.91	67.00	29	52	0.00	2.09	4.82
mp-1627	{'Mo': 4.0, 'S': 6.0}	10	5.69	168.05	61	99	0.00	2.12	4.82
mp-752826	{'Al': 10.0, 'O': 15.0}	25	3.37	250.88	74	166	4.01	1.90	4.82
mp-16720	{'Th': 2.0, 'Al': 4.0}	6	7.26	130.81	43	81	0.00	1.91	4.82
mp-21167	{'Ni': 6.0, 'P': 3.0}	9	7.39	100.04	42	194	0.00	1.40	4.81
mp-2348	{'Zr': 2.0, 'Au': 1.0}	3	9.79	64.38	45	119	0.00	2.30	4.81
mp-1979	{'Ho': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	11.53	69.70	51	131	0.00	2.14	4.81
mp-1571	{'Pr': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.11	75.55	49	103	0.00	2.17	4.81
mp-866222	{'Ac': 2.0, 'Si': 6.0}	8	6.05	171.00	47	80	0.00	1.94	4.80
mp-867870	{'Sm': 2.0, 'Al': 6.0}	8	4.67	164.45	43	69	0.00	1.92	4.79
mp-656887	{'Ni': 6.0, 'O': 8.0}	14	5.60	142.36	78	146	0.40	2.12	4.79
mp-1762	{'Er': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	11.61	106.72	61	144	0.00	2.15	4.78
mp-797	{'Dy': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	11.37	70.37	51	131	0.00	2.16	4.78
mp-1018664	{'Ce': 2.0, 'O': 4.0}	6	5.96	95.87	46	132	2.16	2.03	4.78
mp-978291	{'Mg': 3.0, 'Pa': 1.0}	4	5.26	95.87	31	36	0.00	1.87	4.78
mp-178	{'Th': 2.0, 'Al': 2.0}	4	8.04	106.95	35	72	0.00	1.90	4.78
mp-20735	{'Ce': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	8.13	110.06	37	56	0.00	1.98	4.78
mp-1956	{'Tm': 2.0, 'Ga': 4.0}	6	8.61	118.96	50	73	0.00	2.02	4.77
mp-276	{'Tb': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	9.97	92.09	41	163	0.00	1.59	4.77

mp-10764	{'Hg': 1.0, 'S': 1.0}	2	8.89	43.47	37	47	0.00	2.31	4.77
mp-1388	{'Dy': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	11.33	107.95	60	158	0.00	2.15	4.77
mp-972	{'Mn': 1.0, 'Se': 1.0}	2	5.61	39.60	28	36	0.00	2.09	4.77
mp-865527	{'Y': 2.0, 'Al': 6.0}	8	3.57	157.90	40	72	0.00	1.94	4.77
mp-410	{'Yb': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	16.65	112.36	60	136	0.00	1.96	4.76
mp-21168	{'Eu': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	6.63	72.96	33	34	0.00	2.04	4.75
mp-975868	{'Li': 3.0, 'Al': 1.0}	4	1.18	67.37	18	26	0.00	1.71	4.73
mp-776404	{'Zr': 8.0, 'O': 16.0}	24	5.57	293.84	88	195	3.46	2.02	4.73
mp-546	{'Ho': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	11.47	107.35	60	158	0.00	2.15	4.73
mp-811	{'Ba': 1.0, 'Pt': 5.0}	6	15.44	119.69	63	148	0.00	2.10	4.73
mp-568014	{'Nb': 6.0, 'Bi': 2.0}	8	10.36	156.40	64	158	0.00	2.13	4.73
mp-1860	{'La': 4.0, 'Si': 4.0}	8	5.41	205.05	41	69	0.00	1.86	4.72
mp-1635	{'Tb': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	5.55	54.83	22	41	0.00	1.87	4.72
mp-505527	{'Ti': 20.0, 'Si': 16.0}	36	4.25	549.01	95	142	0.00	2.06	4.72
mp-867342	{'Li': 3.0, 'Ge': 1.0}	4	2.57	60.38	24	22	0.00	1.69	4.72
mp-568792	{'Si': 10.0, 'Rh': 8.0}	18	7.02	261.21	90	181	0.00	2.19	4.72
mp-567929	{'Al': 13.0, 'Os': 4.0}	17	6.98	264.31	77	147	0.00	2.02	4.72
mp-1039074	{'Mg': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	6.89	56.24	26	43	0.00	2.02	4.72
mp-972324	{'Tc': 3.0, 'As': 1.0}	4	10.48	58.48	53	231	0.00	2.22	4.71
mp-20353	{'Gd': 2.0, 'Ga': 2.0}	4	7.53	100.08	36	61	0.00	1.96	4.71
mp-571	{'Ti': 1.0, 'Ni': 1.0}	2	6.60	26.82	27	160	0.00	1.88	4.71
mp-571342	{'Ti': 4.0, 'Ga': 8.0}	12	6.58	189.22	69	107	0.00	2.12	4.70
mp-569402	{'V': 2.0, 'P': 2.0}	4	4.85	56.10	40	87	0.00	2.16	4.70
mp-203	{'Ni': 2.0, 'Te': 2.0}	4	8.39	73.75	34	101	0.00	1.74	4.70
mp-2062	{'La': 2.0, 'Si': 4.0}	6	4.96	130.52	36	78	0.00	1.86	4.70
mp-2574	{'Zr': 2.0, 'O': 4.0}	6	5.80	70.56	48	169	3.89	2.03	4.70
mp-30779	{'Sm': 1.0, 'Mg': 3.0}	4	3.69	100.40	27	35	0.00	1.88	4.69
mp-542583	{'Eu': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.63	70.06	23	33	0.00	1.92	4.69
mp-999142	{'Sn': 2.0, 'O': 2.0}	4	6.85	65.30	49	86	0.00	2.33	4.69
mp-11301	{'Ho': 1.0, 'Cd': 2.0}	3	8.80	73.54	33	57	0.00	1.94	4.69
mp-865362	{'Zn': 3.0, 'Ir': 1.0}	4	11.39	56.64	53	145	0.00	2.17	4.69
mp-1939	{'Er': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	10.50	90.00	43	109	0.00	1.64	4.69
mp-11412	{'Sc': 2.0, 'Ga': 4.0}	6	5.62	109.03	47	80	0.00	2.14	4.68
mp-1343	{'Nd': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	8.92	97.37	38	108	0.00	1.57	4.68
mp-20862	{'Co': 2.0, 'Se': 4.0}	6	6.94	103.82	55	106	0.00	2.26	4.67
mp-27276	{'Si': 12.0, 'Ni': 31.0}	43	7.62	470.17	68	199	0.00	1.08	4.66
mp-1008860	{'Nb': 1.0, 'S': 2.0}	3	4.15	62.90	29	39	0.00	2.07	4.65
mp-769096	{'Mn': 6.0, 'P': 24.0}	30	3.98	448.12	86	119	0.00	2.08	4.65
mp-1556	{'Pu': 1.0, 'Te': 1.0}	2	9.88	62.44	27	71	0.00	1.96	4.65
mp-2102	{'Pr': 4.0, 'Ge': 4.0}	8	6.82	207.86	47	63	0.00	1.96	4.65
mp-2178	{'Yb': 2.0, 'Ga': 4.0}	6	8.39	123.76	48	52	0.00	2.00	4.65
mp-30684	{'Zr': 6.0, 'Ga': 4.0}	10	6.80	201.70	67	112	0.00	2.27	4.64
mp-1245	{'Sr': 2.0, 'N': 1.0}	3	3.49	89.96	23	26	0.00	1.92	4.64
mp-20821	{'Np': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	9.54	77.63	45	62	0.00	2.10	4.64
mp-851	{'Er': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	10.77	42.18	31	99	0.00	2.00	4.64
mp-16529	{'Al': 12.0, 'Ru': 2.0}	14	3.93	222.41	57	112	0.00	2.01	4.63
mp-865899	{'Ti': 3.0, 'Os': 1.0}	4	8.81	62.92	49	157	0.00	2.23	4.62
mp-12659	{'Mn': 8.0, 'Nb': 4.0}	12	8.48	158.84	75	233	0.00	2.10	4.62
mp-30765	{'Li': 1.0, 'Pt': 7.0}	8	18.71	121.80	83	220	0.00	2.17	4.62
mp-514	{'Hf': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	10.32	99.50	58	113	0.00	2.14	4.62
mp-30785	{'Mn': 3.0, 'Pt': 1.0}	4	10.16	58.83	50	90	0.00	2.15	4.61

mp-775757	{'Hf': 8.0, 'O': 16.0}	24	10.01	279.23	102	216	4.02	1.96	4.61
mp-2226	{'Dy': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	10.31	43.33	31	92	0.00	2.03	4.61
mp-233	{'U': 1.0, 'O': 3.0}	4	8.58	55.35	43	150	0.47	2.01	4.60
mp-30507	{'Ce': 1.0, 'Ir': 5.0}	6	17.20	106.29	70	108	0.00	2.18	4.60
mp-1062	{'Ce': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	4.83	56.57	21	68	0.00	1.92	4.59
mp-570430	{'Ta': 4.0, 'Co': 8.0}	12	13.02	152.38	94	222	0.00	2.21	4.59
mp-1695	{'Y': 8.0, 'C': 12.0}	20	5.03	282.22	62	120	0.00	1.75	4.59
mp-10106	{'Ca': 4.0, 'As': 2.0}	6	3.10	165.96	30	35	0.00	1.90	4.58
mp-1589	{'Ti': 4.0, 'Cr': 8.0}	12	6.22	162.05	72	197	0.00	2.20	4.58
mp-562468	{'Ti': 2.0, 'F': 6.0}	8	2.85	122.13	42	102	0.00	2.09	4.58
mp-20181	{'Ce': 8.0, 'C': 12.0}	20	7.07	296.93	70	116	0.00	1.77	4.57
mp-862855	{'Pa': 2.0, 'O': 4.0}	6	8.90	98.18	49	148	0.00	1.98	4.57
mp-862980	{'Pm': 2.0, 'Al': 6.0}	8	4.50	166.65	41	66	0.00	1.92	4.57
mp-13449	{'Yb': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	8.16	63.58	35	33	0.00	2.02	4.57
mp-959	{'La': 2.0, 'Al': 6.0}	8	4.09	178.62	39	73	0.00	1.92	4.56
mp-839	{'V': 6.0, 'Au': 2.0}	8	9.99	116.29	73	186	0.00	2.28	4.56
mp-2201	{'Pb': 1.0, 'Se': 1.0}	2	7.89	60.25	27	47	0.91	2.06	4.56
mp-31348	{'Sc': 4.0, 'In': 2.0}	6	4.87	139.60	38	65	0.00	2.00	4.56
mp-981	{'Sr': 1.0, 'F': 2.0}	3	4.13	50.46	32	65	6.78	2.18	4.56
mp-999355	{'Nb': 2.0, 'N': 2.0}	4	6.60	53.81	40	223	0.00	2.04	4.55
mp-2354	{'Ti': 6.0, 'Hg': 2.0}	8	8.14	140.45	68	119	0.00	2.33	4.54
mp-23171	{'Pr': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	8.21	70.75	28	48	0.00	2.16	4.54
mp-979115	{'Ti': 2.0, 'Ag': 1.0}	3	6.47	52.26	41	105	0.00	2.35	4.54
mp-1840	{'Ti': 8.0, 'O': 16.0}	24	4.01	264.84	78	191	2.29	2.02	4.54
mp-673	{'Ho': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	10.35	90.63	42	103	0.00	1.65	4.54
mp-196	{'Al': 20.0, 'Co': 8.0}	28	4.34	387.00	84	125	0.00	2.05	4.53
mp-12773	{'Zr': 4.0, 'Al': 2.0}	6	5.49	126.78	41	100	0.00	2.04	4.53
mp-684969	{'Sc': 4.0, 'S': 6.0}	10	2.89	213.81	39	56	1.30	1.93	4.53
mp-19326	{'Mn': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.58	126.04	67	103	0.00	2.15	4.53
mp-510219	{'Sn': 4.0, 'Ru': 2.0}	6	9.32	120.66	62	118	0.00	2.37	4.53
mp-1158	{'Lu': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	12.07	67.99	51	138	0.00	2.17	4.52
mp-21468	{'Pu': 1.0, 'In': 1.0}	2	11.62	51.26	31	28	0.00	2.00	4.52
mp-30885	{'Y': 1.0, 'Zn': 5.0}	6	6.67	103.48	48	79	0.00	2.10	4.52
mp-571499	{'Ta': 6.0, 'Ir': 6.0}	12	19.16	194.09	96	274	0.00	2.15	4.51
mp-1654	{'Ce': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	9.26	92.31	40	121	0.00	1.64	4.51
mp-11696	{'As': 6.0, 'W': 4.0}	10	11.06	177.89	74	134	0.00	2.17	4.51
mp-30497	{'Tb': 1.0, 'Cd': 2.0}	3	8.53	74.75	32	56	0.00	1.96	4.51
mp-22752	{'Fe': 2.0, 'Sn': 4.0}	6	8.36	116.45	56	80	0.00	2.25	4.51
mp-540912	{'As': 12.0, 'Ir': 4.0}	16	8.72	317.58	84	130	0.03	2.20	4.50
mp-7760	{'Al': 1.0, 'Sn': 1.0}	2	4.79	50.47	23	47	0.00	2.03	4.50
mp-20711	{'Fe': 3.0, 'Ge': 1.0}	4	8.40	47.48	46	177	0.00	2.10	4.50
mp-24659	{'U': 2.0, 'H': 6.0}	8	11.40	70.24	58	107	0.00	1.71	4.50
mp-1406	{'Mn': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.31	48.02	25	81	0.00	2.02	4.49
mp-786	{'Mn': 2.0, 'Sb': 2.0}	4	7.18	81.72	40	54	0.00	2.12	4.48
mp-754403	{'Zr': 2.0, 'O': 4.0}	6	4.60	89.02	39	174	3.76	1.96	4.48
mp-21260	{'Fe': 3.0, 'Sn': 3.0}	6	7.99	108.79	54	100	0.00	2.22	4.48
mp-9173	{'Ti': 4.0, 'O': 8.0}	12	3.75	141.61	54	94	2.50	1.99	4.48
mp-32548	{'Bi': 1.0, 'O': 2.0}	3	9.56	41.85	45	138	0.00	2.24	4.47
mp-757	{'Li': 6.0, 'As': 2.0}	8	2.45	129.52	30	35	0.64	1.68	4.47
mp-11259	{'Ti': 1.0, 'Au': 1.0}	2	11.53	35.25	39	137	0.00	2.29	4.46
mp-12072	{'U': 1.0, 'Au': 2.0}	3	16.88	62.16	45	109	0.00	2.09	4.46

mp-21385	{'In': 3.0, 'Ni': 2.0}	5	8.42	91.11	46	92	0.00	2.08	4.46
mp-570436	{'Ca': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	12.88	109.44	59	163	0.00	2.13	4.46
mp-2306	{'La': 1.0, 'Mg': 3.0}	4	3.33	105.76	25	37	0.00	1.89	4.46
mp-16522	{'Al': 2.0, 'Pd': 1.0}	3	5.07	52.51	30	112	0.00	2.04	4.46
mp-464	{'Ho': 1.0, 'Se': 1.0}	2	8.59	47.16	25	82	0.00	1.87	4.45
mp-20206	{'Th': 1.0, 'In': 3.0}	4	8.93	107.17	41	68	0.00	2.15	4.45
mp-1559	{'Mg': 24.0, 'N': 16.0}	40	2.66	503.68	77	110	1.51	1.91	4.45
mp-840	{'Sm': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	10.64	111.21	55	140	0.00	2.13	4.44
mp-2237	{'Te': 2.0, 'O': 4.0}	6	5.97	88.85	49	145	0.00	2.17	4.44
mp-30353	{'Ag': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.89	64.33	63	205	0.00	2.30	4.44
mp-348	{'Tm': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	10.99	41.62	31	95	0.00	2.03	4.44
mp-436	{'Sm': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	9.76	43.07	30	95	0.00	2.05	4.42
mp-12574	{'Dy': 2.0, 'C': 1.0}	3	8.13	68.79	30	63	0.00	1.88	4.42
mp-24147	{'Ac': 1.0, 'H': 2.0}	3	7.40	51.39	30	55	0.00	1.83	4.42
mp-980014	{'Tm': 1.0, 'Th': 3.0}	4	11.24	127.81	36	51	0.00	1.90	4.42
mp-33104	{'Sm': 4.0, 'O': 2.0}	6	7.98	131.89	43	85	0.00	1.95	4.42
mp-1716	{'Rh': 8.0, 'O': 12.0}	20	7.97	211.56	104	233	0.57	2.24	4.42
mp-349	{'Yb': 3.0, 'Si': 5.0}	8	6.25	175.24	42	53	0.00	1.83	4.42
mp-2560	{'Ti': 3.0, 'Hg': 1.0}	4	8.05	70.96	49	117	0.00	2.35	4.41
mp-2696	{'Mg': 1.0, 'Ag': 1.0}	2	5.92	37.10	30	65	0.00	2.25	4.41
mp-32777	{'W': 6.0, 'O': 18.0}	24	6.13	376.77	88	162	1.23	2.12	4.41
mp-8484	{'Zn': 4.0, 'O': 8.0}	12	5.31	121.83	62	144	2.17	2.00	4.40
mp-567089	{'Yb': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	12.51	36.62	34	80	0.00	2.06	4.40
mp-2130	{'Lu': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	11.06	87.81	44	109	0.00	1.70	4.40
mp-570684	{'Zr': 4.0, 'Os': 8.0}	12	15.28	205.00	94	265	0.00	2.27	4.40
mp-976588	{'Ho': 1.0, 'Th': 3.0}	4	11.22	127.45	36	54	0.00	1.91	4.40
mp-570691	{'Ti': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	6.02	72.36	40	114	0.00	2.21	4.40
mp-938	{'Ge': 1.0, 'Te': 1.0}	2	5.91	56.26	24	31	0.82	2.03	4.40
mp-10256	{'V': 2.0, 'Te': 2.0}	4	6.68	88.75	39	62	0.00	2.17	4.39
mp-23711	{'Mg': 4.0, 'H': 8.0}	12	1.45	120.56	33	48	3.64	1.68	4.39
mp-1001011	{'Ta': 4.0, 'O': 12.0}	16	6.15	247.43	70	188	0.00	2.06	4.39
mp-2142	{'Te': 8.0, 'Os': 4.0}	12	10.92	270.99	88	129	0.52	2.41	4.39
mp-1402	{'Sm': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	9.36	95.04	38	94	0.00	1.60	4.39
mp-1746	{'Mg': 4.0, 'F': 8.0}	12	3.29	125.93	56	103	6.72	2.09	4.38
mp-718	{'Sn': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.97	66.28	52	146	0.00	2.28	4.38
mp-11237	{'Sc': 1.0, 'Ag': 1.0}	2	6.21	40.87	32	82	0.00	2.36	4.38
mp-30443	{'Be': 68.0, 'Ru': 12.0}	80	4.18	725.83	116	152	0.00	1.74	4.38
mp-18257	{'Fe': 14.0, 'C': 6.0}	20	7.82	181.36	92	242	0.00	2.03	4.36
mp-1253	{'Ba': 1.0, 'Se': 1.0}	2	4.81	74.74	21	36	2.21	2.05	4.35
mp-685036	{'Al': 16.0, 'O': 24.0}	40	3.57	379.06	89	146	3.30	1.91	4.35
mp-20439	{'Ce': 4.0, 'Al': 4.0}	8	5.90	188.07	42	56	0.00	1.90	4.35
mp-1047	{'Ca': 6.0, 'N': 4.0}	10	2.67	184.61	38	72	0.80	1.93	4.35
mp-1009787	{'Ru': 1.0, 'C': 1.0}	2	9.30	20.18	37	313	0.00	2.17	4.35
mp-715262	{'Fe': 2.0, 'O': 2.0}	4	5.58	42.78	42	120	0.00	2.16	4.34
mp-1038916	{'Mg': 1.0, 'Al': 3.0}	4	2.46	71.08	25	61	0.00	1.95	4.34
mp-554355	{'Ca': 1.0, 'F': 2.0}	3	3.05	42.50	29	40	5.20	2.16	4.34
mp-636331	{'V': 3.0, 'Pt': 1.0}	4	10.24	56.39	48	156	0.00	2.15	4.34
mp-2643	{'Ti': 3.0, 'Cu': 4.0}	7	6.75	97.88	61	132	0.00	2.33	4.33
mp-862901	{'Pm': 1.0, 'F': 3.0}	4	7.19	46.66	46	145	5.10	2.20	4.33
mp-11456	{'Hf': 4.0, 'Pt': 12.0}	16	19.26	263.35	106	233	0.00	2.14	4.33
mp-389	{'Si': 4.0, 'Pd': 4.0}	8	7.40	120.67	58	149	0.00	2.15	4.33

mp-20305	{'In': 1.0, 'As': 1.0}	2	5.34	59.05	25	49	0.31	2.19	4.32
mp-754531	{'Al': 8.0, 'O': 12.0}	20	3.12	217.41	58	107	4.37	1.86	4.31
mp-7381	{'Tb': 1.0, 'Mg': 3.0}	4	3.91	98.39	26	31	0.00	1.87	4.30
mp-20155	{'Co': 2.0, 'Sn': 4.0}	6	8.84	111.34	55	101	0.00	2.24	4.30
mp-30686	{'Zr': 4.0, 'Ga': 6.0}	10	7.10	183.16	67	111	0.00	2.30	4.30
mp-21087	{'U': 1.0, 'As': 1.0}	2	12.06	43.10	29	94	0.00	1.93	4.30
mp-2806	{'Yb': 1.0, 'Sn': 1.0}	2	8.89	54.50	27	41	0.00	2.02	4.29
mp-1678	{'Pu': 1.0, 'Rh': 3.0}	4	14.26	64.36	55	219	0.00	2.25	4.29
mp-510623	{'Fe': 12.0, 'C': 4.0}	16	7.83	152.24	81	223	0.00	2.02	4.28
mp-559435	{'Co': 2.0, 'F': 6.0}	8	3.44	112.00	47	95	0.00	2.20	4.28
mp-11249	{'Lu': 1.0, 'Au': 1.0}	2	14.00	44.13	35	95	0.00	2.14	4.28
mp-30852	{'Ti': 1.0, 'Pt': 8.0}	9	19.08	139.97	86	242	0.00	2.22	4.28
mp-547622	{'Pm': 2.0, 'O': 3.0}	5	7.34	76.48	42	129	3.96	2.01	4.28
mp-684768	{'Sm': 4.0, 'O': 6.0}	10	7.13	162.50	57	123	0.00	2.03	4.27
mp-999484	{'Y': 1.0, 'Ti': 1.0}	2	4.64	48.95	22	29	0.00	2.01	4.27
mp-570744	{'Si': 3.0, 'As': 4.0}	7	4.12	154.82	39	59	0.41	2.06	4.27
mp-2752	{'Nb': 6.0, 'Au': 2.0}	8	10.88	145.23	62	184	0.00	2.14	4.27
mp-2170	{'Li': 2.0, 'Pt': 1.0}	3	8.50	40.80	31	68	0.00	1.77	4.26
mp-978285	{'Mg': 3.0, 'Mn': 1.0}	4	2.70	78.75	25	46	0.00	1.95	4.26
mp-569249	{'Ta': 6.0, 'Au': 2.0}	8	17.02	144.39	68	203	0.00	2.06	4.25
mp-973896	{'Ni': 3.0, 'I': 1.0}	4	9.21	54.61	32	125	0.00	1.61	4.25
mp-866189	{'Ce': 1.0, 'Cd': 2.0}	3	7.95	76.25	30	51	0.00	1.96	4.24
mp-11841	{'Ce': 1.0, 'Ag': 1.0}	2	8.65	47.59	30	57	0.00	2.17	4.24
mp-7846	{'Zn': 6.0, 'P': 4.0}	10	4.59	186.79	50	65	0.12	2.09	4.24
mp-972828	{'Cu': 3.0, 'Si': 1.0}	4	7.59	47.87	51	139	0.00	2.36	4.24
mp-973556	{'Lu': 1.0, 'Th': 3.0}	4	11.32	127.83	36	50	0.00	1.94	4.23
mp-775910	{'Zr': 10.0, 'O': 20.0}	30	6.01	340.41	97	188	3.31	2.07	4.23
mp-976838	{'Ni': 6.0, 'Au': 2.0}	8	12.25	101.10	46	173	0.00	1.53	4.23
mp-1017540	{'Zr': 2.0, 'Cd': 2.0}	4	7.55	89.61	37	83	0.00	2.08	4.23
mp-6945	{'Si': 4.0, 'O': 8.0}	12	2.17	183.53	41	16	5.50	1.92	4.22
mp-13156	{'Hf': 2.0, 'Ag': 2.0}	4	12.04	79.02	50	117	0.00	2.26	4.22
mp-1261	{'Eu': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	6.76	53.42	23	37	0.00	1.94	4.21
mp-556	{'Zr': 2.0, 'Ni': 2.0}	4	7.40	67.31	35	138	0.00	1.93	4.20
mp-421	{'Dy': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	10.09	92.17	41	184	0.00	1.72	4.20
mp-567345	{'Nb': 3.0, 'Rh': 3.0}	6	10.08	96.79	57	218	0.00	2.23	4.20
mp-20033	{'Sn': 2.0, 'Ir': 2.0}	4	12.93	79.87	55	155	0.00	2.38	4.20
mp-16513	{'Nd': 2.0, 'Al': 6.0}	8	4.41	169.49	38	66	0.00	1.91	4.20
mp-567695	{'U': 2.0, 'Mn': 4.0}	6	13.49	85.65	55	219	0.00	1.99	4.19
mp-24286	{'Zr': 1.0, 'H': 2.0}	3	5.54	27.93	29	130	0.00	1.80	4.19
mp-976272	{'Li': 1.0, 'Ca': 3.0}	4	1.41	150.26	16	14	0.00	1.81	4.19
mp-1630	{'Zr': 6.0, 'Hg': 2.0}	8	8.92	176.55	58	104	0.00	2.21	4.19
mp-2399	{'Y': 1.0, 'Hg': 1.0}	2	9.24	52.01	27	65	0.00	2.03	4.19
mp-551	{'Ba': 2.0, 'Al': 4.0}	6	4.08	155.72	32	42	0.00	1.94	4.19
mp-1009221	{'Na': 1.0, 'N': 1.0}	2	1.97	31.25	18	22	0.00	2.00	4.18
mp-692	{'Tb': 2.0, 'C': 1.0}	3	7.80	70.18	27	61	0.00	1.81	4.18
mp-11418	{'Tb': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	7.76	78.78	38	66	0.00	2.07	4.18
mp-384	{'Mg': 2.0, 'P': 8.0}	10	2.47	199.58	37	58	0.67	1.99	4.18
mp-1001831	{'Li': 2.0, 'B': 2.0}	4	2.10	28.09	25	120	1.43	1.78	4.18
mp-672289	{'Ge': 12.0, 'N': 16.0}	28	5.12	355.50	91	166	2.08	2.14	4.18
mp-30501	{'Ti': 2.0, 'Cd': 1.0}	3	6.22	55.60	33	91	0.00	2.16	4.17
mp-571262	{'Ca': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	7.49	109.09	49	123	0.00	2.19	4.17

mp-2221	{'Zr': 2.0, 'Ag': 1.0}	3	7.43	64.90	40	101	0.00	2.41	4.17
mp-865342	{'Zn': 3.0, 'Rh': 1.0}	4	8.80	56.42	46	128	0.00	2.20	4.16
mp-978276	{'Mg': 3.0, 'Co': 1.0}	4	3.18	68.92	27	51	0.00	1.97	4.15
mp-971826	{'Tl': 3.0, 'H': 1.0}	4	9.77	104.42	42	213	0.00	2.23	4.15
mp-569833	{'Zr': 4.0, 'Ga': 2.0}	6	6.79	123.37	47	107	0.00	2.21	4.15
mp-976422	{'Hf': 3.0, 'C': 1.0}	4	12.91	70.41	39	113	0.00	1.84	4.15
mp-569927	{'Er': 1.0, 'Zn': 5.0}	6	8.04	102.05	47	79	0.00	2.06	4.15
mp-567454	{'Nd': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	6.97	84.17	35	65	0.00	2.03	4.15
mp-1705	{'Sb': 4.0, 'O': 10.0}	14	6.37	168.78	75	127	0.79	2.20	4.14
mp-570960	{'Hf': 4.0, 'Os': 8.0}	12	18.41	201.68	91	274	0.00	2.19	4.14
mp-690760	{'Ti': 2.0, 'H': 2.0}	4	4.06	39.94	32	128	0.00	1.94	4.14
mp-20971	{'Sn': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.39	67.21	58	201	0.00	2.28	4.14
mp-1009639	{'Pr': 1.0, 'N': 1.0}	2	5.97	43.10	24	93	1.78	2.04	4.13
mp-2743	{'Li': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	6.95	27.07	27	73	0.00	1.97	4.13
mp-2016	{'Pr': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	8.67	98.99	37	149	0.00	1.68	4.13
mp-2116	{'Zr': 2.0, 'Mn': 4.0}	6	7.67	87.07	49	180	0.00	2.12	4.12
mp-979423	{'Y': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	6.30	78.60	37	54	0.00	2.14	4.12
mp-684597	{'In': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	6.90	56.97	27	59	0.00	2.22	4.12
mp-2491	{'Er': 1.0, 'Se': 1.0}	2	8.79	46.51	24	82	0.00	1.87	4.12
mp-755071	{'Sn': 2.0, 'O': 4.0}	6	5.87	85.24	50	140	1.50	2.27	4.12
mp-1018148	{'Sc': 1.0, 'Au': 2.0}	3	12.94	56.34	45	107	0.00	2.27	4.12
mp-1018132	{'Al': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	5.84	67.05	22	37	0.30	2.05	4.11
mp-19713	{'Sc': 6.0, 'In': 2.0}	8	4.44	186.64	39	63	0.00	2.00	4.10
mp-20055	{'Np': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	11.65	51.12	29	67	0.00	2.04	4.10
mp-1307	{'Li': 2.0, 'Ga': 2.0}	4	4.15	61.28	29	34	0.00	1.89	4.10
mp-13450	{'Hf': 6.0, 'Sb': 6.0}	12	10.78	277.58	61	101	0.00	1.95	4.10
mp-23285	{'Ce': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	8.36	69.35	26	41	0.00	2.13	4.10
mp-21109	{'La': 1.0, 'Al': 4.0}	5	3.84	106.62	29	70	0.00	1.92	4.10
mp-10638	{'Zr': 6.0, 'Sb': 6.0}	12	7.42	286.08	58	95	0.00	2.07	4.09
mvc-13455	{'Mo': 2.0, 'N': 4.0}	6	5.30	77.67	43	168	0.00	2.08	4.08
mp-972916	{'Mg': 2.0, 'Cu': 2.0}	4	4.67	62.53	36	69	0.00	2.19	4.08
mp-2183	{'Th': 1.0, 'Se': 1.0}	2	9.82	52.59	25	98	0.00	1.93	4.07
mp-556464	{'Si': 12.0, 'O': 24.0}	36	2.67	449.04	71	136	4.05	1.95	4.07
mp-569668	{'V': 2.0, 'Se': 2.0}	4	6.06	71.14	38	49	0.00	2.17	4.07
mp-776456	{'Ti': 12.0, 'O': 18.0}	30	4.72	303.15	87	213	0.00	2.04	4.05
mp-974474	{'Re': 2.0, 'Br': 2.0}	4	12.35	71.58	48	121	0.00	2.20	4.05
mp-213	{'Ca': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	5.53	43.95	22	58	0.00	1.96	4.05
mp-966800	{'In': 2.0, 'P': 2.0}	4	4.57	105.97	31	58	0.51	2.16	4.05
mp-2192	{'B': 2.0, 'Pt': 2.0}	4	15.26	44.81	47	262	0.00	1.92	4.04
mp-29210	{'Li': 4.0, 'Ga': 2.0}	6	2.98	93.14	29	33	0.00	1.81	4.04
mp-568705	{'Yb': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	16.05	37.80	33	109	0.00	2.00	4.03
mp-864995	{'Dy': 2.0, 'Al': 6.0}	8	5.14	157.37	40	71	0.00	1.92	4.03
mp-11826	{'Ca': 1.0, 'Pd': 5.0}	6	8.54	111.22	49	113	0.00	2.16	4.03
mp-13208	{'Mg': 4.0, 'Pt': 2.0}	6	6.98	115.96	40	73	0.00	1.96	4.03
mp-1066	{'Yb': 1.0, 'N': 1.0}	2	10.38	29.91	30	94	0.00	1.99	4.03
mp-17383	{'Ni': 8.0, 'Ge': 4.0}	12	8.85	142.68	44	168	0.00	1.38	4.03
mp-1848	{'Te': 8.0, 'Ru': 4.0}	12	8.75	270.36	78	124	0.14	2.43	4.03
mp-557142	{'Li': 4.0, 'S': 2.0}	6	1.61	95.03	24	37	3.31	1.86	4.02
mp-569446	{'Ni': 2.0, 'Pb': 2.0}	4	11.39	77.54	37	86	0.00	1.88	4.02
mp-1018100	{'Al': 2.0, 'Sb': 2.0}	4	4.08	121.09	28	49	0.91	2.11	4.02
mp-11294	{'Dy': 1.0, 'Cd': 2.0}	3	8.67	74.16	30	56	0.00	1.97	4.02

mp-2529	{'Pr': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	10.07	114.38	50	131	0.00	2.12	4.02
mp-2647	{'Al': 2.0, 'Au': 1.0}	3	7.48	55.73	33	105	0.00	2.11	4.02
mp-999027	{'Ti': 3.0, 'Al': 1.0}	4	4.20	67.51	32	110	0.00	2.13	4.01
mp-2339	{'Ti': 6.0, 'Pt': 2.0}	8	8.77	128.30	58	166	0.00	2.17	4.01
mp-978279	{'Mg': 3.0, 'Cu': 1.0}	4	2.97	76.38	26	46	0.00	2.01	4.01
mp-10903	{'Al': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	12.48	29.55	32	186	0.00	2.01	4.01
mp-1274	{'Co': 2.0, 'S': 2.0}	4	6.06	49.84	49	160	0.00	2.48	4.00
mp-986	{'Ce': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	7.24	47.13	24	53	0.00	1.99	4.00
mp-9459	{'Y': 8.0, 'C': 10.0}	18	4.73	291.91	52	101	0.00	1.77	3.99
mp-972048	{'Zn': 6.0, 'Mo': 1.0}	7	6.98	116.22	50	69	0.00	2.14	3.98
mp-684668	{'Ca': 2.0, 'C': 4.0}	6	2.10	101.42	24	58	2.86	1.77	3.98
mp-2780	{'Fe': 3.0, 'Se': 4.0}	7	7.00	114.62	51	88	0.00	2.17	3.98
mp-13053	{'Sr': 4.0, 'Si': 4.0}	8	3.46	221.91	31	50	0.00	1.86	3.98
mp-998	{'Al': 4.0, 'Cu': 2.0}	6	4.38	89.06	40	99	0.00	2.13	3.98
mp-11239	{'Zr': 2.0, 'Ag': 2.0}	4	8.09	81.78	47	106	0.00	2.44	3.98
mp-2825	{'Er': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	11.64	69.42	45	134	0.00	2.14	3.98
mp-15178	{'Lu': 8.0, 'C': 14.0}	22	8.80	295.95	75	126	0.00	1.81	3.97
mp-20174	{'Ni': 3.0, 'Sn': 4.0}	7	8.45	127.86	47	98	0.00	2.01	3.96
mp-19717	{'Te': 1.0, 'Pb': 1.0}	2	7.86	70.76	24	40	1.06	2.08	3.96
mp-10048	{'Ga': 1.0, 'As': 1.0}	2	5.96	40.28	26	63	0.00	2.16	3.96
mp-2598	{'Ta': 5.0, 'Sb': 4.0}	9	12.04	191.88	60	107	0.00	2.07	3.96
mp-568992	{'Zr': 4.0, 'Ir': 4.0}	8	12.60	149.47	65	187	0.00	2.22	3.96
mp-978281	{'Mg': 3.0, 'Ga': 1.0}	4	2.88	82.34	25	47	0.00	2.01	3.95
mp-998987	{'Ti': 3.0, 'Ge': 1.0}	4	5.60	64.11	37	122	0.00	2.20	3.95
mp-8182	{'As': 12.0, 'Rh': 4.0}	16	6.88	316.21	72	116	0.00	2.22	3.95
mp-1819	{'Sb': 4.0, 'O': 8.0}	12	6.35	160.88	67	97	2.03	2.21	3.94
mp-1543	{'Ge': 4.0, 'Pt': 2.0}	6	10.32	109.53	52	115	0.00	2.17	3.94
mp-12086	{'Cu': 3.0, 'Pt': 1.0}	4	12.41	51.60	52	159	0.00	2.24	3.94
mp-18695	{'Fe': 15.0, 'Co': 1.0}	16	8.08	184.37	77	184	0.00	2.07	3.94
mp-12700	{'Nb': 4.0, 'Pt': 12.0}	16	17.54	256.81	100	250	0.00	2.19	3.93
mp-1546	{'Dy': 1.0, 'Mg': 3.0}	4	3.99	97.87	25	33	0.00	1.89	3.93
mp-437	{'Mg': 1.0, 'Au': 1.0}	2	10.18	36.11	30	79	0.00	2.09	3.93
mp-674	{'La': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.00	76.05	42	122	0.00	2.16	3.92
mp-2294	{'Al': 6.0, 'Ir': 2.0}	8	7.27	124.84	49	151	0.00	2.02	3.92
mp-9935	{'Ge': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	6.53	49.46	24	36	0.00	2.06	3.92
mp-33032	{'La': 2.0, 'O': 3.0}	5	5.66	95.59	34	102	0.46	1.98	3.91
mp-1349	{'Sr': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	12.91	122.94	50	118	0.00	2.04	3.91
mp-22309	{'Co': 4.0, 'Se': 8.0}	12	7.22	199.44	66	99	0.00	2.20	3.91
mp-1689	{'Hf': 4.0, 'Re': 8.0}	12	17.50	209.05	75	262	0.00	2.00	3.91
mp-1018059	{'Ga': 2.0, 'Sb': 2.0}	4	5.30	119.95	33	35	0.00	2.23	3.91
mp-978283	{'Mg': 3.0, 'In': 1.0}	4	3.38	92.36	25	22	0.00	1.95	3.90
mp-30045	{'Co': 4.0, 'Ge': 8.0}	12	7.70	176.07	68	120	0.00	2.19	3.89
mp-1347	{'Th': 6.0, 'P': 8.0}	14	8.43	323.20	58	108	0.27	1.95	3.89
mp-12777	{'Al': 1.0, 'Cu': 3.0}	4	7.27	49.72	46	131	0.00	2.32	3.89
mp-715553	{'V': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.05	135.95	54	97	0.00	2.08	3.88
mp-569051	{'Mg': 4.0, 'H': 8.0}	12	1.61	108.52	32	48	2.38	1.67	3.88
mp-981458	{'Yb': 1.0, 'Ta': 1.0}	2	13.07	44.97	28	69	0.00	1.94	3.88
mp-22323	{'In': 4.0, 'O': 6.0}	10	6.94	132.83	60	151	0.96	2.16	3.87
mp-978294	{'Mg': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	3.51	90.64	25	37	0.00	1.95	3.87
mp-2688	{'Ho': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	8.02	77.49	37	66	0.00	2.09	3.86
mp-11504	{'Mn': 1.0, 'Zn': 3.0}	4	7.45	55.98	40	88	0.00	2.14	3.86

mp-1018751	{'La': 2.0, 'S': 4.0}	6	4.95	136.18	33	89	0.00	1.95	3.86
mp-2474	{'Y': 1.0, 'Ag': 1.0}	2	6.70	48.77	27	62	0.00	2.25	3.86
mp-982	{'Tm': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	11.76	68.93	45	139	0.00	2.17	3.85
mp-10390	{'Ta': 4.0, 'O': 10.0}	14	8.43	174.02	71	129	3.10	2.06	3.85
mp-999294	{'Pd': 3.0, 'N': 1.0}	4	8.11	68.26	41	120	0.00	2.21	3.85
mp-32927	{'Tb': 4.0, 'O': 6.0}	10	7.79	156.03	55	130	0.00	2.03	3.85
mp-571172	{'In': 2.0, 'Bi': 1.0}	3	8.07	90.25	35	44	0.00	2.33	3.85
mp-759943	{'Al': 32.0, 'O': 48.0}	80	3.57	757.85	111	197	4.06	1.91	3.84
mp-2210	{'Zr': 1.0, 'Cu': 1.0}	2	7.33	35.07	31	117	0.00	2.32	3.84
mp-1055	{'Cd': 1.0, 'Se': 1.0}	2	6.69	47.48	26	59	0.00	2.19	3.83
mp-467	{'Th': 3.0, 'N': 4.0}	7	10.45	119.54	48	148	1.67	1.95	3.83
mp-9853	{'Lu': 2.0, 'P': 10.0}	12	4.63	236.58	47	66	0.19	1.99	3.83
mp-2063	{'Pr': 2.0, 'O': 3.0}	5	6.78	80.82	40	121	3.88	2.10	3.83
mp-648	{'Na': 2.0, 'S': 1.0}	3	1.83	70.93	18	28	2.44	2.01	3.83
mp-2077	{'Dy': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	5.71	54.31	20	45	0.00	1.93	3.82
mp-973004	{'Sc': 1.0, 'Ru': 3.0}	4	9.46	61.09	48	206	0.00	2.35	3.82
mp-555763	{'Zn': 3.0, 'S': 3.0}	6	4.00	121.47	33	69	2.06	2.02	3.82
mp-1754	{'U': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	15.04	70.58	37	77	0.00	2.05	3.82
mp-974417	{'Re': 3.0, 'Sb': 1.0}	4	17.30	65.32	44	200	0.00	1.94	3.81
mp-1306	{'Th': 2.0, 'Al': 6.0}	8	6.09	170.69	40	89	0.00	1.93	3.81
mp-978509	{'Si': 3.0, 'Ru': 1.0}	4	5.62	54.80	35	154	0.00	2.10	3.81
mp-6914	{'Ca': 2.0, 'Ga': 2.0}	4	3.48	104.83	24	35	0.00	1.96	3.81
mp-1008806	{'Re': 1.0, 'C': 2.0}	3	13.40	26.05	44	346	0.00	2.06	3.81
mp-22079	{'As': 4.0, 'Rh': 4.0}	8	9.20	128.44	61	156	0.00	2.27	3.80
mp-9925	{'Ca': 4.0, 'Sb': 2.0}	6	3.49	192.24	27	32	0.00	1.92	3.80
mp-22389	{'Mn': 6.0, 'Sn': 2.0}	8	7.72	121.89	55	89	0.00	2.17	3.80
mp-2851	{'V': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	7.99	122.35	47	98	0.00	2.22	3.80
mp-2466	{'Er': 1.0, 'Au': 2.0}	3	14.87	62.68	40	104	0.00	2.14	3.80
mp-976971	{'Na': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	8.68	65.45	41	93	0.00	2.17	3.79
mp-976150	{'Na': 1.0, 'Al': 3.0}	4	2.26	76.20	22	49	0.00	1.96	3.79
mp-13031	{'Mg': 1.0, 'Se': 1.0}	2	3.17	54.01	16	44	2.55	1.90	3.79
mp-1380	{'Zn': 6.0, 'Ru': 2.0}	8	8.80	112.23	58	138	0.00	2.17	3.79
mp-975512	{'In': 1.0, 'Sb': 3.0}	4	7.30	109.27	38	41	0.00	2.29	3.78
mp-2176	{'Zn': 1.0, 'Te': 1.0}	2	5.42	59.15	22	46	1.08	2.13	3.77
mp-1077353	{'Ti': 2.0, 'H': 4.0}	6	3.39	48.84	31	141	0.00	1.74	3.77
mp-971683	{'C': 9.0, 'N': 12.0}	21	2.34	196.24	53	68	2.19	1.90	3.77
mp-30599	{'Ti': 2.0, 'Cu': 3.0}	5	6.87	69.21	48	132	0.00	2.33	3.76
mp-12071	{'Ti': 6.0, 'As': 2.0}	8	5.73	126.64	47	126	0.00	2.12	3.76
mp-22514	{'Mn': 4.0, 'Sn': 2.0}	6	7.85	96.70	45	95	0.00	2.09	3.76
mp-862656	{'Er': 5.0, 'Al': 15.0}	20	5.41	381.04	59	75	0.00	1.92	3.76
mp-15837	{'Nb': 5.0, 'Se': 4.0}	9	7.48	173.28	53	116	0.00	2.15	3.75
mp-30882	{'Ti': 4.0, 'Zn': 8.0}	12	6.49	182.84	63	106	0.00	2.20	3.75
mp-560	{'Tm': 1.0, 'Au': 2.0}	3	15.07	62.04	41	103	0.00	2.18	3.75
mp-866172	{'Ho': 1.0, 'Mg': 3.0}	4	4.05	97.52	24	35	0.00	1.88	3.75
mp-253	{'Sc': 2.0, 'Co': 4.0}	6	6.58	82.15	48	142	0.00	2.24	3.74
mp-1734	{'Ca': 1.0, 'Zn': 5.0}	6	5.68	107.29	39	61	0.00	2.07	3.74
mp-866286	{'Ac': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	5.99	69.70	20	33	0.00	2.00	3.74
mp-571655	{'B': 12.0, 'C': 3.0}	15	1.99	138.47	34	116	0.00	1.58	3.74
mp-714969	{'Mo': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.63	183.34	51	89	1.41	2.06	3.74
mp-622497	{'V': 12.0, 'O': 20.0}	32	4.44	347.98	85	185	0.00	2.09	3.74
mp-8134	{'U': 1.0, 'O': 3.0}	4	9.10	52.18	40	167	1.64	2.07	3.73

mp-19306	{'Fe': 6.0, 'O': 8.0}	14	4.95	155.34	64	176	0.00	2.18	3.73
mp-1090	{'Fe': 2.0, 'Se': 2.0}	4	7.10	63.10	38	64	0.00	2.15	3.73
mp-398	{'Er': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	8.11	77.04	36	99	0.00	2.09	3.73
mp-20086	{'Mn': 2.0, 'Sn': 4.0}	6	8.17	118.91	48	64	0.00	2.23	3.73
mp-21345	{'La': 4.0, 'Ge': 4.0}	8	6.50	216.29	38	64	0.00	1.91	3.73
mp-274	{'Nb': 5.0, 'Sb': 4.0}	9	8.12	194.67	55	98	0.00	2.21	3.73
mp-11684	{'Si': 8.0, 'O': 16.0}	24	2.80	285.44	59	103	5.82	1.99	3.73
mp-684591	{'Al': 16.0, 'O': 24.0}	40	3.48	388.93	79	139	3.34	1.91	3.72
mp-1949	{'Ti': 4.0, 'Mn': 8.0}	12	6.90	151.82	61	210	0.00	2.09	3.72
mp-1018128	{'Sc': 1.0, 'Ag': 2.0}	3	7.53	57.50	39	86	0.00	2.43	3.72
mp-11557	{'Sc': 4.0, 'Re': 8.0}	12	13.23	209.57	75	226	0.00	2.18	3.72
mp-9945	{'Co': 2.0, 'Te': 4.0}	6	7.93	131.58	46	85	0.00	2.23	3.71
mp-27731	{'Hf': 1.0, 'H': 2.0}	3	11.47	26.14	34	149	0.00	1.77	3.71
mp-755769	{'Zr': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.43	184.68	46	159	4.21	1.96	3.71
mp-1968	{'La': 2.0, 'O': 3.0}	5	6.52	83.02	37	116	3.88	2.05	3.71
mp-1319	{'Zr': 2.0, 'Te': 2.0}	4	7.37	98.58	33	68	0.00	2.08	3.71
mp-11441	{'Hf': 4.0, 'Ga': 6.0}	10	10.57	177.93	64	117	0.00	2.17	3.70
mp-1013529	{'Sr': 3.0, 'N': 2.0}	5	3.91	123.43	28	22	0.21	1.96	3.70
mp-971703	{'V': 3.0, 'Ag': 1.0}	4	7.40	58.48	43	171	0.00	2.32	3.70
mp-23713	{'Ca': 4.0, 'H': 8.0}	12	1.96	142.72	32	47	3.19	1.71	3.70
mp-20941	{'U': 1.0, 'In': 3.0}	4	9.59	100.84	37	64	0.00	2.13	3.70
mp-570293	{'Nb': 10.0, 'Ga': 6.0}	16	8.17	273.95	77	165	0.00	2.26	3.69
mp-13175	{'Pt': 1.0, 'N': 1.0}	2	15.31	22.67	40	221	0.00	2.24	3.69
mp-2463	{'Lu': 2.0, 'Fe': 4.0}	6	10.43	91.24	50	83	0.00	2.10	3.69
mp-1018101	{'Al': 1.0, 'Co': 3.0}	4	7.41	45.69	46	187	0.00	2.35	3.68
mp-1584	{'Yb': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	17.30	107.03	55	166	0.00	2.06	3.68
mp-1008285	{'Cr': 3.0, 'Fe': 1.0}	4	7.71	45.60	34	253	0.00	1.88	3.68
mp-11455	{'Hf': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	16.80	36.92	31	185	0.00	1.97	3.68
mp-1698	{'Sr': 2.0, 'Sn': 2.0}	4	4.85	141.31	25	47	0.00	2.00	3.68
mp-1260	{'Sr': 1.0, 'Pd': 5.0}	6	8.93	115.28	47	108	0.00	2.18	3.68
mp-556253	{'Tm': 6.0, 'O': 9.0}	15	9.64	199.35	71	156	4.20	2.02	3.68
mp-216	{'Sc': 16.0, 'O': 24.0}	40	3.75	488.44	79	168	3.81	1.97	3.68
mp-20849	{'Pd': 3.0, 'Pb': 1.0}	4	12.50	69.95	45	132	0.00	2.19	3.68
mp-567871	{'Nb': 10.0, 'Si': 6.0}	16	6.90	264.27	64	185	0.00	2.07	3.67
mp-1345	{'Ca': 6.0, 'P': 6.0}	12	2.43	290.89	33	49	0.70	1.90	3.67
mp-981375	{'Hf': 2.0, 'Mg': 6.0}	8	4.81	173.48	37	67	0.00	1.97	3.66
mp-13446	{'Co': 6.0, 'P': 3.0}	9	7.66	96.78	72	225	0.00	2.44	3.66
mp-569406	{'Tm': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	8.45	117.74	41	69	0.00	2.00	3.65
mp-985280	{'Co': 3.0, 'Bi': 1.0}	4	11.41	56.14	47	129	0.00	2.23	3.65
mp-30883	{'V': 4.0, 'Zn': 5.0}	9	6.97	126.40	56	125	0.00	2.19	3.65
mp-1791	{'Al': 20.0, 'Rh': 8.0}	28	5.23	432.77	77	131	0.00	2.08	3.64
mp-22116	{'Eu': 1.0, 'Ge': 2.0}	3	6.29	78.45	23	48	0.00	1.85	3.64
mp-568516	{'K': 3.0, 'Bi': 1.0}	4	3.26	166.05	20	32	0.13	1.92	3.64
mp-1708	{'Y': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.10	58.97	20	60	0.00	1.98	3.64
mp-861936	{'Li': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	9.12	59.39	41	122	0.00	2.16	3.64
mp-639789	{'Fe': 8.0, 'Re': 12.0}	20	16.88	263.70	101	251	0.00	2.09	3.64
mp-11453	{'Hf': 4.0, 'Pd': 12.0}	16	12.77	258.99	85	179	0.00	2.18	3.64
mvc-11686	{'Sn': 1.0, 'O': 2.0}	3	5.75	43.49	34	42	2.00	2.26	3.64
mp-795	{'Li': 8.0, 'Si': 8.0}	16	1.86	249.71	34	52	0.00	1.75	3.63
mp-30603	{'Zr': 1.0, 'Cu': 5.0}	6	8.49	79.96	56	137	0.00	2.36	3.63
mp-635966	{'Mo': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.64	183.34	50	89	1.38	2.06	3.63

mp-2822	{'Tm': 1.0, 'Se': 1.0}	2	8.99	45.78	22	80	0.00	1.85	3.63
mp-1059	{'Nd': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	7.38	57.73	20	52	0.00	1.87	3.63
mp-1247	{'Sb': 8.0, 'Ir': 4.0}	12	10.57	273.85	72	118	0.45	2.33	3.62
mp-14549	{'Cu': 1.0, 'O': 1.0}	2	6.97	18.96	32	178	0.00	2.26	3.62
mp-13117	{'Cu': 1.0, 'N': 1.0}	2	5.92	21.75	28	206	0.00	2.19	3.62
mp-16365	{'Sn': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	4.82	82.79	20	30	0.00	2.19	3.62
mp-754741	{'Zr': 4.0, 'O': 8.0}	12	5.02	162.95	50	109	3.43	1.99	3.62
mp-11471	{'Sc': 1.0, 'Hg': 1.0}	2	9.28	43.93	29	76	0.00	2.23	3.61
mp-568865	{'Zr': 4.0, 'Te': 4.0}	8	7.32	198.68	44	87	0.00	2.08	3.61
mp-987	{'Zn': 1.0, 'Cu': 1.0}	2	8.25	25.95	32	114	0.00	2.27	3.60
mp-12608	{'Cu': 1.0, 'Pt': 7.0}	8	19.41	122.27	74	245	0.00	2.23	3.60
mp-1025096	{'Er': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	8.39	117.95	41	59	0.00	2.01	3.60
mp-932	{'Sc': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	6.03	70.02	34	73	0.00	2.15	3.60
mp-12684	{'La': 4.0, 'Al': 4.0}	8	5.19	212.26	34	53	0.00	1.89	3.59
mp-510412	{'Si': 12.0, 'Ru': 16.0}	28	8.86	366.17	103	232	0.00	2.22	3.59
mp-569624	{'Hf': 4.0, 'Cr': 8.0}	12	10.54	177.99	66	190	0.00	2.08	3.59
mp-1009582	{'Ni': 1.0, 'C': 1.0}	2	6.98	16.82	24	284	0.00	1.80	3.59
mp-11359	{'Ga': 2.0, 'Cu': 1.0}	3	7.09	47.55	37	78	0.00	2.35	3.58
mp-972088	{'Zr': 3.0, 'Zn': 1.0}	4	6.74	83.49	38	94	0.00	2.32	3.58
mp-2460	{'Er': 6.0, 'O': 9.0}	15	9.37	203.32	68	152	4.13	2.00	3.58
mp-2675	{'Mg': 8.0, 'Ni': 16.0}	24	6.03	312.02	61	127	0.00	1.73	3.58
mp-616559	{'Ti': 24.0, 'S': 12.0}	36	4.80	530.24	85	147	0.00	2.11	3.58
mp-990	{'Ho': 1.0, 'Au': 2.0}	3	14.65	63.36	38	103	0.00	2.14	3.57
mp-11263	{'Zr': 6.0, 'Au': 2.0}	8	9.20	169.85	52	118	0.00	2.18	3.57
mp-557057	{'Nb': 8.0, 'O': 16.0}	24	5.68	292.37	80	206	0.30	2.16	3.57
mp-18427	{'Nb': 20.0, 'Al': 10.0}	30	6.79	520.44	82	161	0.00	2.07	3.57
mvc-4415	{'Ta': 4.0, 'O': 10.0}	14	7.37	199.10	61	199	2.42	2.04	3.57
mp-17695	{'Sc': 10.0, 'Sn': 6.0}	16	5.10	377.94	51	72	0.00	2.00	3.57
mp-9850	{'Dy': 2.0, 'P': 10.0}	12	4.31	244.54	43	65	0.15	1.98	3.56
mp-978507	{'Sm': 1.0, 'Th': 3.0}	4	10.89	129.09	31	54	0.00	1.92	3.56
mp-696572	{'Ti': 2.0, 'P': 2.0}	4	3.46	75.62	26	99	0.00	2.07	3.56
mp-1795	{'Nb': 1.0, 'F': 3.0}	4	3.37	73.83	29	95	0.00	2.24	3.56
mp-977264	{'Pm': 2.0, 'Mg': 1.0}	3	5.62	92.92	21	39	0.00	1.85	3.55
mp-7424	{'B': 2.0, 'Pd': 4.0}	6	9.52	77.99	48	179	0.00	2.09	3.55
mp-1221	{'V': 6.0, 'Ge': 2.0}	8	6.92	108.26	54	184	0.00	2.25	3.54
mp-580357	{'Cu': 3.0, 'Pd': 1.0}	4	9.62	51.26	47	146	0.00	2.32	3.54
mp-863737	{'Ho': 3.0, 'In': 1.0}	4	9.01	112.29	30	50	0.00	1.92	3.54
mp-1649	{'Fe': 3.0, 'Pt': 1.0}	4	11.41	52.77	40	180	0.00	2.01	3.54
mp-20418	{'Si': 4.0, 'Rh': 8.0}	12	9.54	162.85	73	220	0.00	2.27	3.54
mp-776097	{'Hf': 12.0, 'O': 24.0}	36	9.22	455.02	95	200	4.14	1.92	3.53
mp-20883	{'Fe': 6.0, 'Sn': 2.0}	8	8.46	112.37	53	129	0.00	2.13	3.53
mp-973554	{'K': 3.0, 'Sm': 1.0}	4	1.93	230.00	14	7	0.00	1.73	3.53
mp-1009079	{'Cr': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.37	46.81	24	70	0.00	2.18	3.53
mp-11765	{'Ti': 5.0, 'Se': 4.0}	9	5.57	165.46	46	84	0.00	2.13	3.53
mp-20619	{'Sb': 4.0, 'Rh': 4.0}	8	9.79	152.38	57	135	0.00	2.27	3.53
mp-30536	{'V': 5.0, 'Sb': 4.0}	9	7.31	168.49	53	89	0.00	2.21	3.52
mp-567181	{'Zr': 4.0, 'Rh': 4.0}	8	8.72	147.84	53	162	0.00	2.22	3.52
mp-569366	{'Nb': 6.0, 'Tl': 2.0}	8	10.40	154.25	55	136	0.00	2.19	3.51
mp-973652	{'Lu': 1.0, 'Ru': 3.0}	4	12.30	64.57	49	186	0.00	2.35	3.51
mp-559798	{'Ni': 2.0, 'F': 4.0}	6	4.66	68.98	40	128	4.91	2.14	3.51
mp-862617	{'Ac': 2.0, 'Al': 6.0}	8	5.24	195.04	36	58	0.00	1.96	3.51

mp-10635	{'Sn': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	6.75	59.13	23	50	0.00	2.17	3.50
mp-20369	{'Ce': 1.0, 'In': 3.0}	4	7.71	104.33	34	49	0.00	2.17	3.50
mp-662	{'Ni': 2.0, 'Se': 2.0}	4	7.43	61.56	25	119	0.00	1.58	3.50
mp-976263	{'Li': 3.0, 'Nb': 1.0}	4	2.68	70.47	21	22	0.00	1.83	3.49
mp-978797	{'Sm': 3.0, 'Hf': 1.0}	4	8.65	120.80	28	51	0.00	1.88	3.49
mp-30798	{'Nb': 8.0, 'Zn': 16.0}	24	8.15	364.55	82	141	0.00	2.10	3.48
mp-999188	{'Nb': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	8.85	50.47	24	208	0.00	1.38	3.48
mp-972071	{'V': 3.0, 'Mo': 1.0}	4	7.37	56.04	40	189	0.00	2.27	3.47
mp-865985	{'Cd': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.83	66.17	43	137	0.00	2.23	3.47
mp-19079	{'Co': 2.0, 'O': 2.0}	4	6.31	39.44	38	236	0.00	2.16	3.47
mp-540791	{'Si': 16.0, 'Rh': 12.0}	28	6.89	405.94	88	180	0.00	2.18	3.47
mp-613523	{'Fe': 12.0, 'C': 4.0}	16	7.21	165.51	69	180	0.00	2.06	3.47
mp-27793	{'Nb': 8.0, 'Se': 4.0}	12	7.71	228.06	57	122	0.00	2.13	3.47
mp-11487	{'La': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	15.80	76.13	44	100	0.00	2.12	3.46
mp-22204	{'Co': 8.0, 'P': 4.0}	12	7.74	127.67	79	228	0.00	2.43	3.46
mp-570	{'Nd': 1.0, 'Te': 1.0}	2	7.00	64.45	19	56	0.00	1.91	3.45
mp-2083	{'Sn': 2.0, 'Ir': 1.0}	3	10.69	66.76	36	110	0.00	2.27	3.45
mp-754698	{'Nb': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.81	172.41	51	166	0.00	2.12	3.45
mp-20965	{'Gd': 1.0, 'Cd': 2.0}	3	8.86	71.64	27	45	0.00	1.94	3.45
mp-21873	{'Ni': 4.0, 'As': 8.0}	12	7.15	193.83	54	113	0.00	2.04	3.44
mp-1018144	{'La': 1.0, 'H': 3.0}	4	5.44	43.31	27	92	0.00	1.75	3.44
mp-755	{'Co': 4.0, 'Sb': 8.0}	12	8.19	245.27	65	99	0.00	2.32	3.43
mp-11870	{'Hg': 2.0, 'Rh': 1.0}	3	12.53	66.80	39	88	0.00	2.31	3.43
mp-12675	{'Mn': 1.0, 'Au': 1.0}	2	12.43	33.65	32	116	0.00	2.20	3.43
mp-982557	{'Ho': 2.0, 'Ga': 6.0}	8	8.01	155.12	46	71	0.00	2.07	3.42
mp-867246	{'Tb': 2.0, 'Ga': 6.0}	8	7.78	157.15	45	63	0.00	2.05	3.42
mp-30872	{'Th': 2.0, 'Sn': 4.0}	6	9.10	171.31	39	70	0.00	2.08	3.41
mp-30789	{'U': 2.0, 'Mo': 1.0}	3	16.63	57.12	35	176	0.00	1.98	3.41
mp-999130	{'Tb': 2.0, 'Ni': 2.0}	4	8.95	80.79	26	64	0.00	1.65	3.41
mp-999296	{'Pd': 3.0, 'N': 1.0}	4	10.03	55.16	43	207	0.00	2.24	3.40
mp-554089	{'Si': 4.0, 'O': 8.0}	12	2.20	181.37	35	20	5.67	1.91	3.39
mp-30842	{'Zr': 4.0, 'Pd': 12.0}	16	10.31	264.47	79	169	0.00	2.26	3.39
mp-2285	{'Te': 2.0, 'Ir': 1.0}	3	9.73	76.34	35	84	0.00	2.33	3.39
mp-2685	{'Hg': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	14.01	36.38	35	115	0.00	2.32	3.38
mp-19862	{'Eu': 1.0, 'Si': 2.0}	3	5.57	62.02	22	61	0.00	1.85	3.38
mp-866022	{'Cd': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	17.45	66.37	49	192	0.00	2.23	3.37
mp-1702	{'La': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	9.96	114.95	44	135	0.00	2.12	3.37
mp-1176	{'Tb': 1.0, 'Te': 1.0}	2	8.05	59.12	20	62	0.00	1.92	3.36
mp-972156	{'Tb': 1.0, 'Y': 3.0}	4	5.48	129.05	23	42	0.00	1.87	3.36
mp-998968	{'Ti': 2.0, 'Mo': 2.0}	4	6.86	69.64	32	140	0.00	2.08	3.36
mp-864931	{'Mg': 4.0, 'Co': 8.0}	12	5.94	158.99	57	119	0.00	2.17	3.36
mp-32662	{'W': 6.0, 'O': 18.0}	24	6.11	378.20	73	150	1.50	2.12	3.35
mp-979009	{'Th': 3.0, 'Be': 1.0}	4	10.71	109.28	29	71	0.00	1.84	3.35
mp-11222	{'Sm': 3.0, 'Al': 1.0}	4	6.97	113.96	25	44	0.00	1.84	3.35
mp-1933	{'Cu': 3.0, 'N': 1.0}	4	6.12	55.51	38	116	0.98	2.31	3.35
mp-27505	{'Fe': 6.0, 'Sn': 4.0}	10	8.28	162.39	57	105	0.00	2.19	3.35
mp-20426	{'Fe': 4.0, 'As': 2.0}	6	7.95	77.97	44	140	0.00	2.11	3.35
mp-973143	{'Sc': 1.0, 'Zn': 3.0}	4	6.15	65.13	33	87	0.00	2.15	3.34
mp-866046	{'Ti': 6.0, 'In': 2.0}	8	5.89	145.76	45	108	0.00	2.21	3.34
mp-972876	{'Sc': 6.0, 'Cd': 2.0}	8	4.41	186.43	34	63	0.00	2.01	3.33
mp-13010	{'Y': 2.0, 'Sn': 4.0}	6	6.80	159.49	36	58	0.00	2.11	3.33

mp-979419	{'Dy': 3.0, 'Y': 1.0}	4	7.49	127.86	26	43	0.00	1.90	3.33
mp-1009459	{'Nb': 1.0, 'C': 1.0}	2	7.88	22.10	26	275	0.00	2.02	3.33
mp-972044	{'Yb': 1.0, 'Th': 3.0}	4	11.16	129.31	30	49	0.00	1.92	3.33
mp-978269	{'Mg': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	5.08	101.40	35	63	0.00	2.06	3.33
mp-999485	{'Zn': 1.0, 'N': 1.0}	2	5.45	24.22	22	132	0.00	1.98	3.33
mp-616575	{'Mn': 8.0, 'B': 8.0}	16	4.81	181.54	50	156	0.00	1.86	3.32
mp-568404	{'Li': 9.0, 'Al': 4.0}	13	1.31	216.41	26	31	0.00	1.76	3.31
mp-8053	{'Y': 2.0, 'Co': 2.0}	4	6.04	81.28	30	70	0.00	2.09	3.31
mp-567406	{'Sm': 1.0, 'Zn': 5.0}	6	7.51	105.61	39	75	0.00	2.05	3.31
mp-24721	{'Rb': 1.0, 'H': 1.0}	2	2.61	55.01	13	17	3.20	1.80	3.30
mp-971948	{'Zn': 3.0, 'Co': 1.0}	4	8.10	52.32	38	116	0.00	2.16	3.30
mp-1018104	{'Zr': 2.0, 'Cd': 1.0}	3	7.24	67.67	28	78	0.00	2.13	3.30
mp-865425	{'Zn': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.51	60.79	42	152	0.00	2.24	3.30
mp-573	{'Ni': 3.0, 'Se': 4.0}	7	6.97	117.19	34	91	0.00	1.78	3.30
mp-30801	{'Nd': 1.0, 'Zn': 5.0}	6	7.28	107.56	38	66	0.00	2.04	3.30
mp-2413	{'Ce': 3.0, 'Al': 1.0}	4	7.19	103.32	27	39	0.00	1.92	3.29
mp-7753	{'Mg': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	9.08	62.85	38	140	0.00	2.18	3.29
mp-861605	{'Ac': 1.0, 'H': 3.0}	4	7.81	48.93	30	68	0.68	1.80	3.29
mp-2689	{'Th': 1.0, 'Fe': 5.0}	6	9.43	90.06	44	80	0.00	2.07	3.28
mp-556242	{'Y': 3.0, 'F': 9.0}	12	4.65	156.19	51	134	5.63	2.15	3.28
mp-833	{'Ca': 2.0, 'Pd': 4.0}	6	7.21	116.57	37	94	0.00	2.04	3.28
mp-20828	{'Pt': 3.0, 'Pb': 1.0}	4	18.65	70.55	46	172	0.00	2.15	3.27
mp-1018040	{'Mg': 2.0, 'Se': 2.0}	4	3.18	107.90	20	31	2.58	1.90	3.27
mp-1009217	{'Mn': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	6.72	43.67	22	64	0.00	2.08	3.27
mp-12109	{'Zr': 4.0, 'Re': 8.0}	12	14.50	212.37	66	251	0.00	2.09	3.26
mvc-5816	{'Co': 8.0, 'O': 16.0}	24	5.11	236.62	78	143	0.00	2.18	3.26
mp-673635	{'Fe': 24.0, 'N': 8.0}	32	7.45	323.62	93	200	0.00	2.08	3.25
mp-342	{'Sm': 1.0, 'Te': 1.0}	2	7.44	62.06	19	58	0.00	1.93	3.25
mp-11798	{'Fe': 3.0, 'Pt': 1.0}	4	11.44	52.62	38	128	0.00	2.01	3.25
mp-20012	{'In': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	5.38	72.96	19	35	0.00	2.13	3.25
mp-977128	{'Na': 1.0, 'Ru': 3.0}	4	9.19	58.96	43	172	0.00	2.35	3.25
mp-2391	{'Yb': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	12.00	68.10	39	117	0.00	2.11	3.25
mp-865376	{'Y': 1.0, 'Mg': 3.0}	4	2.73	98.39	19	40	0.00	1.88	3.25
mp-642659	{'V': 8.0, 'H': 4.0}	12	5.89	116.11	54	192	0.00	2.04	3.25
mp-2235	{'Yb': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	11.93	105.51	47	131	0.00	2.13	3.25
mp-554573	{'Si': 4.0, 'O': 8.0}	12	2.11	189.23	33	26	5.62	1.92	3.25
mp-978823	{'Sm': 1.0, 'Y': 3.0}	4	5.25	131.96	22	42	0.00	1.87	3.24
mp-978290	{'Mg': 3.0, 'Os': 1.0}	4	6.32	69.15	29	85	0.00	1.99	3.24
mp-19895	{'Ni': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	7.81	128.49	42	88	0.00	2.23	3.24
mp-862756	{'Pr': 2.0, 'Ga': 6.0}	8	6.84	170.03	43	62	0.00	2.13	3.23
mp-21012	{'Si': 6.0, 'Rh': 10.0}	16	9.14	217.50	76	199	0.00	2.25	3.23
mp-20895	{'Np': 1.0, 'As': 1.0}	2	12.06	42.95	25	60	0.00	1.98	3.22
mp-10426	{'Nb': 2.0, 'O': 5.0}	7	5.30	83.30	43	60	1.89	2.15	3.22
mp-2532	{'Pr': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.75	66.02	19	56	0.00	2.01	3.22
mp-865014	{'Mg': 4.0, 'Cu': 2.0}	6	3.37	110.40	29	56	0.00	2.05	3.22
mp-20725	{'Pb': 2.0, 'O': 4.0}	6	8.92	89.07	45	116	0.01	2.16	3.22
mp-862679	{'Ta': 8.0, 'Zn': 16.0}	24	11.50	360.18	89	152	0.00	2.12	3.22
mp-570093	{'Dy': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	8.09	120.46	38	69	0.00	2.05	3.22
mp-977403	{'Na': 3.0, 'Tl': 1.0}	4	3.70	122.59	23	8	0.00	2.01	3.21
mp-1013546	{'Ca': 3.0, 'Sb': 2.0}	5	3.13	193.10	20	31	0.09	1.89	3.21
mp-504731	{'Eu': 1.0, 'F': 2.0}	3	6.21	50.81	29	66	0.00	2.19	3.21

mp-673174	{'Fe': 24.0, 'N': 9.0}	33	7.44	327.27	94	213	0.00	2.09	3.21
mp-570179	{'Tb': 1.0, 'Au': 2.0}	3	14.20	64.64	35	98	0.00	2.14	3.21
mp-951	{'Ce': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	10.51	109.35	44	190	0.00	2.13	3.21
mp-2673	{'Yb': 1.0, 'Pb': 1.0}	2	10.84	58.23	22	38	0.00	1.94	3.20
mp-15669	{'Ti': 3.0, 'Te': 4.0}	7	6.39	170.05	38	60	0.00	2.13	3.20
mp-13068	{'Lu': 2.0, 'O': 3.0}	5	10.39	63.58	46	158	4.09	2.20	3.20
mp-1002207	{'Re': 1.0, 'N': 1.0}	2	16.63	19.99	33	307	0.00	2.01	3.19
mp-8462	{'Hf': 12.0, 'Al': 8.0}	20	9.89	395.88	64	115	0.00	1.93	3.19
mp-505780	{'Ge': 14.0, 'Ir': 6.0}	20	10.58	340.48	84	143	0.00	2.25	3.19
mp-580236	{'Eu': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	6.94	63.22	18	25	0.00	1.88	3.19
mp-1603	{'Tm': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	8.20	76.57	33	66	0.00	2.10	3.19
mp-569837	{'Ti': 12.0, 'Sb': 4.0}	16	6.00	293.68	56	110	0.00	2.11	3.18
mp-24084	{'K': 1.0, 'H': 1.0}	2	1.44	46.21	11	14	3.54	1.83	3.18
mp-636368	{'Ga': 12.0, 'Fe': 4.0}	16	6.81	258.49	66	102	0.58	2.24	3.18
mp-2450	{'Ca': 2.0, 'Sn': 2.0}	4	4.29	122.83	22	38	0.00	1.97	3.17
mp-309	{'Th': 1.0, 'Ag': 2.0}	3	10.62	70.03	35	71	0.00	2.32	3.17
mp-12055	{'La': 1.0, 'Cd': 2.0}	3	7.39	81.77	24	45	0.00	1.98	3.17
mp-19856	{'Sn': 2.0, 'Pt': 2.0}	4	12.45	83.68	43	127	0.00	2.33	3.17
mp-1934	{'Li': 2.0, 'Zn': 2.0}	4	4.08	58.85	25	42	0.00	1.94	3.16
mp-972228	{'Zr': 12.0, 'As': 8.0}	20	6.85	410.44	61	126	0.00	2.07	3.16
mp-306	{'B': 6.0, 'O': 9.0}	15	2.34	147.97	36	33	6.34	1.72	3.16
mp-10281	{'Zn': 4.0, 'S': 4.0}	8	4.00	162.06	33	69	2.05	2.02	3.15
mp-2827	{'Y': 1.0, 'Co': 5.0}	6	7.65	83.29	46	148	0.00	2.28	3.15
mp-317	{'Sn': 4.0, 'Rh': 4.0}	8	10.39	141.67	54	139	0.00	2.25	3.15
mp-570698	{'V': 3.0, 'Au': 1.0}	4	9.96	58.34	41	180	0.00	2.27	3.15
mp-7390	{'Sr': 1.0, 'Ge': 2.0}	3	4.94	78.29	20	27	0.00	1.89	3.14
mp-978964	{'Th': 3.0, 'Mg': 1.0}	4	9.78	122.33	27	57	0.00	1.88	3.14
mp-555934	{'V': 2.0, 'F': 4.0}	6	3.71	79.66	35	93	0.00	2.21	3.14
mp-974865	{'Nd': 1.0, 'Y': 3.0}	4	5.15	132.57	21	42	0.00	1.85	3.13
mp-13363	{'Si': 2.0, 'Pt': 6.0}	8	16.72	121.84	60	205	0.00	2.13	3.13
mp-29900	{'Ni': 4.0, 'Ge': 8.0}	12	7.38	183.69	45	109	0.00	1.83	3.13
mp-2756	{'Ce': 1.0, 'Ag': 1.0}	2	7.92	52.03	24	33	0.00	2.20	3.13
mp-1001826	{'V': 1.0, 'N': 1.0}	2	4.93	21.87	22	225	0.00	2.06	3.13
mp-622570	{'Ti': 4.0, 'Cu': 6.0}	10	6.87	138.44	58	133	0.00	2.34	3.13
mp-20724	{'Mg': 2.0, 'Pb': 1.0}	3	5.13	82.75	20	35	0.00	1.91	3.13
mp-380	{'Zn': 2.0, 'Se': 2.0}	4	5.06	94.80	26	56	1.20	2.07	3.12
mp-1000	{'Ba': 1.0, 'Te': 1.0}	2	4.94	89.09	16	26	1.86	2.02	3.12
mp-12674	{'Mn': 1.0, 'Au': 1.0}	2	12.46	33.56	30	117	0.00	2.20	3.12
mp-565	{'Sn': 4.0, 'Rh': 2.0}	6	9.25	122.23	46	108	0.00	2.31	3.12
mp-568908	{'Ti': 2.0, 'As': 2.0}	4	5.74	71.02	29	112	0.00	2.09	3.12
mp-20298	{'Sm': 1.0, 'In': 1.0}	2	7.78	56.59	21	56	0.00	2.07	3.12
mp-927	{'Cu': 4.0, 'P': 8.0}	12	4.29	194.50	50	89	0.96	2.27	3.12
mp-335	{'Ba': 1.0, 'Ga': 4.0}	5	5.94	116.30	33	42	0.00	2.18	3.11
mp-1911	{'Ce': 1.0, 'Sn': 3.0}	4	7.84	105.17	31	60	0.00	2.15	3.11
mp-2258	{'Cu': 3.0, 'Au': 1.0}	4	11.97	53.75	47	142	0.00	2.36	3.11
mp-976407	{'Li': 3.0, 'Ac': 1.0}	4	3.66	112.54	20	15	0.00	1.86	3.10
mp-1018165	{'Pt': 1.0, 'C': 1.0}	2	15.31	22.47	32	236	0.00	2.08	3.09
mp-20158	{'Pb': 1.0, 'O': 2.0}	3	10.07	39.45	36	282	0.00	2.25	3.09
mp-974066	{'Nd': 3.0, 'Sm': 1.0}	4	6.92	139.86	22	34	0.00	1.80	3.08
mp-623	{'Hg': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	18.02	36.46	36	147	0.00	2.33	3.08
mp-567412	{'Y': 10.0, 'Sn': 6.0}	16	5.78	460.13	44	62	0.00	1.94	3.07

mp-764949	{'Mn': 2.0, 'F': 6.0}	8	3.18	117.05	35	46	0.34	2.13	3.07
mp-22879	{'Pu': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	11.27	66.74	23	44	0.00	2.08	3.07
mp-568636	{'Ti': 8.0, 'Cr': 16.0}	24	6.23	323.57	75	198	0.00	2.20	3.07
mp-1050	{'Ni': 6.0, 'S': 8.0}	14	4.84	208.68	43	115	0.00	1.89	3.06
mp-1219	{'Ba': 1.0, 'Ga': 2.0}	3	5.17	88.84	24	35	0.00	2.21	3.06
mp-1025	{'Th': 1.0, 'Au': 2.0}	3	14.98	69.37	33	118	0.00	2.11	3.06
mp-569708	{'Ti': 7.0, 'Pt': 21.0}	28	17.03	432.20	107	234	0.00	2.17	3.06
mp-556788	{'Si': 4.0, 'O': 8.0}	12	2.70	148.00	37	42	4.80	1.96	3.06
mp-864941	{'Mg': 2.0, 'Sc': 4.0}	6	2.65	142.97	23	49	0.00	1.97	3.05
mp-21215	{'In': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	10.13	36.25	28	111	0.00	2.25	3.05
mp-1008776	{'Sr': 1.0, 'C': 2.0}	3	3.66	50.64	18	46	1.80	1.79	3.05
mp-1031	{'Gd': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	8.34	53.68	19	39	0.00	1.88	3.05
mp-570483	{'V': 10.0, 'Si': 6.0}	16	5.29	212.93	57	184	0.00	2.15	3.05
mp-2338	{'Tb': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	7.88	122.19	35	60	0.00	1.99	3.04
mp-646	{'Pr': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	7.17	58.65	19	47	0.00	1.99	3.04
mp-1007824	{'Ga': 2.0, 'N': 2.0}	4	3.69	75.36	23	50	1.37	2.00	3.04
mp-1873	{'Zn': 2.0, 'F': 4.0}	6	4.67	73.46	35	98	3.48	2.10	3.03
mp-30753	{'La': 1.0, 'Pd': 5.0}	6	9.79	113.79	42	115	0.00	2.15	3.03
mp-861653	{'Th': 1.0, 'H': 3.0}	4	9.54	40.91	30	101	0.00	1.73	3.03
mp-15697	{'Sr': 4.0, 'As': 2.0}	6	4.15	200.41	24	30	0.00	1.90	3.03
mp-560338	{'Cr': 2.0, 'F': 6.0}	8	3.57	101.48	39	37	3.09	2.18	3.03
mp-510691	{'Hf': 10.0, 'Sn': 8.0}	18	11.52	394.18	63	112	0.00	1.99	3.02
mp-1018717	{'Hf': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	9.51	147.43	37	92	0.00	2.07	3.02
mp-1018023	{'Mn': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	8.21	57.33	34	122	0.00	2.12	3.01
mp-728	{'Li': 2.0, 'Pd': 1.0}	3	4.70	42.51	21	48	0.00	1.85	3.01
mp-1008500	{'Ba': 2.0, 'O': 2.0}	4	5.93	85.91	28	67	2.43	2.11	3.01
mp-30876	{'Zr': 6.0, 'Sn': 2.0}	8	7.22	180.48	40	103	0.00	2.11	3.01
mp-2324	{'Pr': 1.0, 'Cd': 2.0}	3	7.64	79.54	24	48	0.00	2.01	3.00
mp-2849	{'U': 3.0, 'S': 6.0}	9	8.41	179.06	40	90	0.00	1.91	2.99
mp-1667	{'Co': 4.0, 'Ge': 2.0}	6	9.08	69.67	51	200	0.00	2.34	2.99
mp-18922	{'Mn': 5.0, 'O': 8.0}	13	4.71	141.90	53	136	0.63	2.18	2.99
mp-2686	{'Ca': 2.0, 'N': 1.0}	3	2.16	72.33	15	35	0.00	1.92	2.99
mp-11180	{'Na': 2.0, 'C': 2.0}	4	1.61	72.36	15	35	0.00	1.78	2.99
mp-919	{'Ho': 1.0, 'Te': 1.0}	2	8.43	57.62	19	65	0.00	1.93	2.99
mp-561428	{'Ni': 2.0, 'F': 6.0}	8	4.14	92.82	40	44	0.00	2.14	2.99
mp-426	{'Co': 2.0, 'Se': 2.0}	4	7.80	58.69	39	168	0.00	2.37	2.98
mp-1073	{'Ca': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	4.41	57.43	15	31	0.00	1.89	2.98
mp-977059	{'Mg': 1.0, 'Pd': 5.0}	6	9.83	93.98	45	142	0.00	2.21	2.98
mp-24093	{'Cu': 2.0, 'H': 2.0}	4	6.67	32.12	33	108	0.73	1.99	2.98
mp-2863	{'Ce': 1.0, 'Cd': 3.0}	4	8.06	98.30	27	69	0.00	1.96	2.97
mp-30047	{'Sn': 12.0, 'Mo': 6.0}	18	8.70	381.73	69	115	0.00	2.27	2.97
mp-2499	{'Ba': 2.0, 'Si': 2.0}	4	4.31	127.52	20	34	0.00	1.90	2.97
mp-31324	{'Li': 4.0, 'In': 2.0}	6	3.82	111.92	25	24	0.00	1.82	2.97
mp-7891	{'Mg': 3.0, 'As': 2.0}	5	3.41	108.43	23	54	0.87	1.96	2.97
mp-13498	{'Tb': 2.0, 'Mg': 1.0}	3	6.51	87.33	20	39	0.00	1.86	2.97
mp-2388	{'Cd': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.91	57.67	21	54	0.00	2.18	2.96
mp-865450	{'Th': 2.0, 'Ga': 6.0}	8	8.74	167.59	43	74	0.00	2.10	2.96
mp-644500	{'Zn': 7.0, 'Mo': 1.0}	8	7.69	119.52	46	102	0.00	2.16	2.96
mp-1919	{'Zr': 4.0, 'Cr': 8.0}	12	7.10	182.57	53	179	0.00	2.16	2.96
mp-980192	{'Yb': 1.0, 'Os': 3.0}	4	19.50	63.34	46	222	0.00	2.20	2.95
mp-669917	{'Zr': 4.0, 'Rh': 4.0}	8	8.70	148.17	48	156	0.00	2.25	2.95

mp-2159	{'Dy': 1.0, 'Te': 1.0}	2	8.25	58.39	19	63	0.00	1.96	2.95
mp-685148	{'Ho': 4.0, 'O': 6.0}	10	11.38	110.31	56	148	0.00	2.02	2.95
mp-7542	{'Ge': 2.0, 'P': 6.0}	8	3.74	147.14	33	47	0.00	2.08	2.95
mp-7275	{'Ba': 4.0, 'Si': 8.0}	12	4.14	310.49	34	51	0.02	1.92	2.94
mp-572	{'Sm': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	7.82	55.77	18	52	0.00	1.89	2.94
mp-22912	{'Np': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	11.46	64.62	23	52	0.00	2.11	2.94
mp-568382	{'Mn': 2.0, 'Bi': 2.0}	4	9.44	92.84	30	56	0.00	2.03	2.94
mp-32686	{'Co': 2.0, 'O': 4.0}	6	4.49	67.25	36	66	0.00	2.16	2.93
mp-18905	{'Fe': 4.0, 'O': 4.0}	8	5.61	85.08	44	147	0.00	2.16	2.93
mp-1560	{'La': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.48	68.26	17	37	0.00	1.96	2.93
mp-21844	{'U': 1.0, 'Tl': 3.0}	4	13.08	108.09	37	47	0.00	2.22	2.92
mp-978514	{'Sm': 1.0, 'Tm': 3.0}	4	8.84	123.51	25	41	0.00	1.88	2.92
mp-988939	{'Al': 1.0, 'As': 1.0}	2	4.26	39.68	17	74	0.00	2.01	2.92
mp-973265	{'K': 3.0, 'Zr': 1.0}	4	1.70	203.38	16	0	0.00	2.05	2.92
mp-1200	{'Tb': 1.0, 'Co': 5.0}	6	9.06	83.13	46	148	0.00	2.27	2.92
mp-9095	{'Tb': 4.0, 'Si': 6.0}	10	6.11	218.49	35	75	0.00	1.86	2.92
mp-2682	{'Sb': 8.0, 'Rh': 4.0}	12	8.48	271.39	58	104	0.00	2.33	2.91
mp-570018	{'Ce': 3.0, 'Pb': 1.0}	4	9.16	113.82	28	47	0.00	2.01	2.91
mp-570923	{'Y': 4.0, 'Re': 8.0}	12	13.50	226.91	57	203	0.00	2.04	2.91
mp-21253	{'Eu': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	4.23	69.23	14	11	0.00	1.85	2.91
mp-11313	{'Zr': 1.0, 'Cd': 3.0}	4	8.17	87.06	28	77	0.00	2.00	2.91
mp-30613	{'Er': 2.0, 'Sn': 4.0}	6	8.62	156.00	35	60	0.00	2.08	2.91
mp-861943	{'B': 2.0, 'Pt': 6.0}	8	16.20	122.23	55	177	0.00	2.09	2.90
mp-10680	{'Ba': 1.0, 'Se': 1.0}	2	5.55	64.70	17	38	1.21	2.03	2.90
mp-13495	{'Zr': 2.0, 'Pd': 2.0}	4	8.47	77.47	33	134	0.00	2.20	2.90
mp-12769	{'Y': 2.0, 'Si': 4.0}	6	4.14	116.38	26	85	0.00	1.92	2.90
mp-543001	{'Zr': 10.0, 'Sn': 8.0}	18	7.61	406.40	62	104	0.00	2.22	2.89
mp-1008610	{'Au': 1.0, 'N': 1.0}	2	13.76	25.46	31	172	0.00	2.19	2.89
mp-23712	{'Mg': 4.0, 'H': 8.0}	12	1.77	98.97	27	61	2.02	1.65	2.89
mp-30725	{'Y': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	11.03	73.79	29	64	0.00	2.13	2.89
mp-568293	{'Ca': 12.0, 'N': 8.0}	20	2.78	354.74	40	72	1.31	1.92	2.89
mp-1008928	{'Eu': 1.0, 'Se': 1.0}	2	7.12	53.84	18	79	0.00	1.95	2.89
mp-902	{'Ba': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	4.81	70.01	15	21	0.00	1.93	2.89
mp-11286	{'Ca': 1.0, 'Hg': 1.0}	2	7.22	55.39	19	35	0.00	2.01	2.88
mp-30495	{'Sm': 1.0, 'Cd': 2.0}	3	8.11	76.79	23	52	0.00	1.95	2.88
mp-31138	{'Mn': 2.0, 'Pd': 6.0}	8	10.19	121.93	53	151	0.00	2.27	2.88
mp-19920	{'Ce': 3.0, 'Ga': 1.0}	4	8.08	100.74	27	46	0.00	1.99	2.88
mp-999145	{'Sm': 2.0, 'Ni': 2.0}	4	8.24	84.30	23	66	0.00	1.70	2.88
mp-2637	{'Y': 1.0, 'Se': 1.0}	2	5.77	48.34	17	86	0.00	1.94	2.88
mp-542640	{'Ge': 4.0, 'Pt': 4.0}	8	13.12	135.49	54	143	0.00	2.21	2.88
mp-2606	{'Ba': 1.0, 'Pd': 5.0}	6	9.23	120.37	40	99	0.00	2.18	2.87
mp-22682	{'In': 2.0, 'Pt': 1.0}	3	10.37	67.99	30	95	0.00	2.20	2.87
mvc-15643	{'W': 4.0, 'O': 12.0}	16	6.90	223.11	61	37	1.50	2.12	2.87
mp-697068	{'Si': 3.0, 'Pd': 6.0}	9	9.20	130.41	51	180	0.00	2.18	2.87
mp-30506	{'Ce': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	11.76	76.40	29	56	0.00	2.11	2.87
mp-1008752	{'Ce': 1.0, 'Te': 1.0}	2	7.72	57.55	20	9	0.00	2.01	2.86
mp-1373	{'Nb': 6.0, 'Ge': 2.0}	8	8.42	138.60	44	172	0.00	2.15	2.86
mp-705519	{'Ni': 15.0, 'O': 16.0}	31	6.36	296.62	81	169	0.00	2.08	2.86
mp-973092	{'Sc': 1.0, 'Cu': 3.0}	4	6.95	56.28	36	106	0.00	2.33	2.85
mp-496	{'Sr': 4.0, 'Si': 8.0}	12	3.38	282.79	31	58	0.05	1.89	2.85
mp-495	{'Lu': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	8.47	75.29	31	61	0.00	2.09	2.85

mp-13503	{'Sc': 4.0, 'Zn': 8.0}	12	5.69	205.10	48	81	0.00	2.18	2.85
mp-13173	{'Pt': 2.0, 'N': 2.0}	4	15.12	45.92	46	203	0.00	2.25	2.84
mp-31379	{'Zr': 4.0, 'Sb': 2.0}	6	7.37	137.02	34	106	0.00	2.11	2.84
mp-30585	{'Ho': 1.0, 'Cu': 5.0}	6	9.04	88.67	45	126	0.00	2.28	2.84
mp-1029	{'Ba': 1.0, 'F': 2.0}	3	4.69	62.01	24	54	6.62	2.24	2.83
mp-288	{'Pt': 2.0, 'S': 2.0}	4	9.87	76.47	33	156	0.47	2.14	2.83
mp-7955	{'Li': 6.0, 'Sb': 2.0}	8	2.98	159.01	24	28	0.57	1.77	2.83
mp-11461	{'Ho': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	12.92	72.76	29	62	0.00	2.07	2.82
mp-973232	{'Nd': 1.0, 'Tm': 3.0}	4	8.65	124.99	24	40	0.00	1.87	2.82
mp-1007664	{'In': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.90	66.14	37	169	0.00	2.22	2.82
mp-975797	{'Pr': 1.0, 'Sm': 3.0}	4	7.11	138.18	23	38	0.00	1.94	2.82
mp-567612	{'Sc': 4.0, 'Os': 8.0}	12	13.98	202.16	66	237	0.00	2.23	2.82
mp-865194	{'Tm': 1.0, 'F': 3.0}	4	9.02	41.61	38	150	5.51	2.20	2.82
mp-1199	{'Ho': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	5.84	53.81	16	46	0.00	1.89	2.82
mp-7565	{'Sb': 4.0, 'Ru': 4.0}	8	9.82	150.78	51	147	0.00	2.33	2.82
mp-1025077	{'Tb': 2.0, 'Se': 4.0}	6	7.52	139.99	30	76	0.00	1.92	2.81
mp-17413	{'Ti': 6.0, 'Rh': 10.0}	16	9.26	236.00	71	205	0.00	2.31	2.81
mp-23222	{'Li': 3.0, 'Bi': 1.0}	4	4.99	76.44	21	28	0.38	1.78	2.81
mp-999298	{'Pd': 3.0, 'Au': 1.0}	4	13.34	64.26	42	176	0.00	2.30	2.81
mp-776	{'La': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	6.83	61.07	17	44	0.00	1.95	2.81
mp-11369	{'Er': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	13.06	72.25	29	63	0.00	2.07	2.80
mp-16960	{'Al': 8.0, 'Pt': 16.0}	24	15.39	359.98	85	206	0.00	2.06	2.80
mp-571030	{'Tl': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	12.76	68.14	39	133	0.00	2.23	2.80
mp-862854	{'Pa': 2.0, 'Pd': 6.0}	8	12.67	144.19	50	151	0.00	2.16	2.80
mp-862658	{'Li': 1.0, 'Cu': 3.0}	4	6.93	47.35	36	90	0.00	2.29	2.80
mp-19033	{'W': 4.0, 'O': 12.0}	16	6.87	224.13	59	56	1.56	2.12	2.80
mp-17848	{'Nb': 24.0, 'Si': 8.0}	32	7.40	550.93	74	184	0.00	2.07	2.80
mp-30851	{'Ti': 6.0, 'Pt': 10.0}	16	14.80	251.07	73	202	0.00	2.14	2.80
mp-672661	{'Ga': 1.0, 'Fe': 3.0}	4	8.15	48.36	34	140	0.00	2.14	2.80
mp-20887	{'V': 4.0, 'Sn': 8.0}	12	7.77	246.48	52	98	0.00	2.22	2.80
mp-30886	{'Y': 1.0, 'Zn': 12.0}	13	7.03	206.35	52	79	0.00	2.13	2.79
mp-998894	{'Y': 1.0, 'C': 1.0}	2	4.11	40.80	14	68	0.00	1.79	2.79
mp-30339	{'Er': 1.0, 'Ag': 2.0}	3	9.94	63.98	32	80	0.00	2.32	2.79
mp-11367	{'Dy': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	12.75	73.40	29	62	0.00	2.09	2.79
mp-1009756	{'Ca': 2.0, 'Pb': 1.0}	3	4.28	111.43	17	40	0.77	1.98	2.79
mp-1570	{'Y': 2.0, 'Fe': 4.0}	6	6.87	96.93	36	92	0.00	2.13	2.79
mp-9027	{'Ti': 4.0, 'S': 8.0}	12	3.14	236.66	36	56	0.01	2.11	2.78
mp-607111	{'Al': 4.0, 'Pt': 12.0}	16	16.80	242.04	74	218	0.00	2.09	2.78
mp-976976	{'Mg': 1.0, 'Pd': 5.0}	6	9.86	93.74	43	139	0.00	2.21	2.78
mp-23259	{'Li': 1.0, 'Br': 1.0}	2	3.44	41.90	16	21	5.09	2.06	2.77
mp-21400	{'Ga': 3.0, 'Pt': 2.0}	5	11.71	84.99	40	131	0.00	2.17	2.77
mp-2564	{'Sr': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	2.52	73.87	11	19	0.00	1.85	2.77
mp-12546	{'Ti': 2.0, 'Cu': 6.0}	8	7.65	103.57	51	140	0.00	2.34	2.77
mp-867143	{'Sm': 2.0, 'Ga': 6.0}	8	7.36	162.22	38	61	0.00	2.05	2.77
mp-463	{'K': 1.0, 'F': 1.0}	2	2.42	39.89	17	29	6.07	2.32	2.77
mp-1025415	{'Ce': 1.0, 'Pd': 7.0}	8	11.03	133.29	50	153	0.00	2.22	2.77
mp-510437	{'In': 3.0, 'Pd': 2.0}	5	8.88	104.22	37	89	0.00	2.25	2.76
mp-1009238	{'Hf': 2.0, 'Tl': 1.0}	3	13.74	67.86	28	126	0.00	2.00	2.76
mp-614777	{'Ni': 2.0, 'F': 6.0}	8	4.24	90.60	38	51	0.99	2.13	2.76
mp-1018126	{'Ga': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	6.87	67.40	20	28	0.00	2.21	2.76
mp-24726	{'Ti': 1.0, 'H': 2.0}	3	3.83	21.61	20	138	0.00	1.76	2.75

mp-569170	{'Ca': 2.0, 'Te': 2.0}	4	4.22	131.93	19	33	1.63	1.92	2.75
mp-21197	{'Nd': 1.0, 'In': 3.0}	4	7.70	105.39	28	53	0.00	2.13	2.75
mp-11800	{'Co': 3.0, 'Se': 4.0}	7	7.22	113.34	44	95	0.00	2.31	2.75
mp-1125	{'Li': 8.0, 'S': 4.0}	12	1.75	174.53	26	31	3.92	1.81	2.75
mp-31380	{'Sm': 2.0, 'Pd': 2.0}	4	8.94	95.44	27	80	0.00	1.98	2.75
mp-775907	{'Y': 12.0, 'O': 18.0}	30	5.20	432.79	63	128	3.57	2.00	2.75
mp-1018683	{'Dy': 2.0, 'Se': 4.0}	6	7.70	138.22	30	78	0.00	1.93	2.75
mp-11107	{'Ac': 2.0, 'O': 3.0}	5	8.97	92.88	35	103	3.56	2.14	2.74
mp-2797	{'Y': 1.0, 'Cu': 5.0}	6	7.54	89.61	42	109	0.00	2.30	2.74
mp-10014	{'Ta': 1.0, 'S': 2.0}	3	6.16	66.05	23	18	0.00	2.04	2.74
mp-917	{'Ca': 2.0, 'C': 4.0}	6	2.16	98.42	19	56	2.38	1.77	2.74
mp-20560	{'Ce': 2.0, 'S': 2.0}	4	3.49	163.89	17	30	0.00	1.93	2.74
mp-11449	{'Hf': 4.0, 'Mn': 8.0}	12	11.31	169.42	53	192	0.00	1.98	2.74
mp-1854	{'Eu': 2.0, 'Pd': 4.0}	6	10.03	120.73	37	86	0.00	2.07	2.74
mp-15624	{'Sr': 4.0, 'Sb': 2.0}	6	4.30	229.18	22	33	0.00	1.91	2.74
mp-999318	{'Ni': 2.0, 'Bi': 2.0}	4	11.13	79.86	30	88	0.00	1.98	2.74
mp-12602	{'Pr': 1.0, 'Zn': 5.0}	6	7.15	108.75	34	64	0.00	2.07	2.73
mp-1280	{'Er': 1.0, 'Te': 1.0}	2	8.59	57.00	18	63	0.00	1.93	2.73
mp-20023	{'Pr': 1.0, 'In': 1.0}	2	7.15	59.39	20	55	0.00	2.19	2.73
mp-973455	{'Li': 2.0, 'Mg': 4.0}	6	1.46	126.11	17	30	0.00	1.88	2.72
mp-13456	{'Zn': 5.0, 'S': 5.0}	10	4.00	202.53	33	70	2.10	2.02	2.72
mp-554405	{'Zn': 5.0, 'S': 5.0}	10	4.00	202.50	33	69	2.13	2.02	2.72
mp-1607	{'Yb': 1.0, 'Cu': 5.0}	6	9.33	87.32	44	88	0.00	2.26	2.72
mp-976262	{'Li': 3.0, 'Mg': 3.0}	6	1.26	123.10	16	25	0.00	1.85	2.72
mp-1018728	{'Ho': 2.0, 'Se': 4.0}	6	7.84	136.83	30	75	0.00	1.93	2.71
mp-984785	{'Ac': 1.0, 'Mg': 3.0}	4	4.33	114.89	20	33	0.00	1.95	2.71
mp-2120	{'Ho': 1.0, 'Ag': 2.0}	3	9.78	64.64	31	75	0.00	2.32	2.70
mp-570557	{'Nb': 6.0, 'Co': 18.0}	24	9.00	298.46	88	199	0.00	2.35	2.70
mp-542	{'Sr': 1.0, 'Hg': 1.0}	2	7.33	65.33	18	81	0.00	2.07	2.70
mp-697179	{'Zr': 2.0, 'H': 2.0}	4	5.80	52.84	24	114	0.00	1.86	2.70
mp-999124	{'Tb': 2.0, 'Pd': 2.0}	4	9.65	91.28	28	78	0.00	2.00	2.70
mp-9888	{'Ir': 3.0, 'Se': 8.0}	11	9.01	222.66	55	84	0.00	2.31	2.70
mp-489	{'Ge': 12.0, 'Ir': 3.0}	15	8.87	271.28	57	109	0.00	2.14	2.70
mp-1038	{'Mg': 2.0, 'Cu': 4.0}	6	5.82	86.45	38	94	0.00	2.29	2.70
mp-2482	{'Ca': 1.0, 'C': 2.0}	3	2.20	48.36	14	57	1.51	1.79	2.69
mp-2469	{'Cd': 1.0, 'S': 1.0}	2	4.58	52.42	17	53	1.05	2.14	2.69
mp-2578	{'Ni': 1.0, 'Te': 2.0}	3	7.55	69.04	23	49	0.00	2.02	2.69
mp-9978	{'Er': 2.0, 'Se': 4.0}	6	7.95	135.76	30	80	0.00	1.93	2.69
mp-30468	{'Th': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	11.93	61.41	22	75	0.00	2.10	2.69
mp-454	{'Na': 1.0, 'Ga': 4.0}	5	4.85	103.46	29	45	0.00	2.20	2.69
mp-793	{'Ca': 10.0, 'Si': 6.0}	16	2.19	431.89	28	41	0.00	1.86	2.69
mp-22585	{'Ge': 4.0, 'Rh': 8.0}	12	10.73	172.43	64	192	0.00	2.31	2.68
mp-10204	{'Mn': 2.0, 'Se': 2.0}	4	5.77	77.04	26	58	0.00	2.09	2.68
mp-571188	{'Pr': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	7.19	124.98	25	46	0.00	2.08	2.68
mp-754553	{'Zn': 12.0, 'N': 8.0}	20	6.17	241.50	57	132	0.22	2.01	2.67
mp-982873	{'Na': 3.0, 'Tl': 1.0}	4	3.70	122.67	20	18	0.00	2.04	2.67
mp-30797	{'Nb': 5.0, 'Te': 4.0}	9	8.06	200.93	43	90	0.00	2.19	2.67
mp-978280	{'Mg': 3.0, 'Ga': 1.0}	4	2.85	83.22	19	43	0.00	2.01	2.67
mp-978270	{'Mg': 2.0, 'Zr': 6.0}	8	5.46	181.18	35	80	0.00	2.16	2.66
mp-1017985	{'Ti': 2.0, 'Ag': 2.0}	4	7.34	70.46	35	111	0.00	2.41	2.66
mp-974584	{'Re': 1.0, 'Au': 3.0}	4	18.82	68.56	44	195	0.00	2.28	2.66

mp-976239	{'Li': 3.0, 'Mg': 3.0}	6	1.28	122.03	16	26	0.00	1.86	2.66
mp-18759	{'Mn': 6.0, 'O': 8.0}	14	4.59	165.45	47	127	0.84	2.11	2.66
mp-1008920	{'Mn': 2.0, 'Ge': 1.0}	3	7.44	40.74	27	186	0.00	2.13	2.66
mp-401	{'Sc': 8.0, 'S': 12.0}	20	2.87	430.37	37	56	1.07	1.93	2.65
mp-977057	{'Np': 1.0, 'As': 3.0}	4	9.66	79.34	29	40	0.00	2.00	2.65
mp-1022728	{'Cu': 3.0, 'O': 2.0}	5	6.15	60.14	37	110	0.00	2.30	2.65
mp-1783	{'Mn': 1.0, 'S': 1.0}	2	3.41	42.34	15	56	0.00	2.05	2.65
mp-557837	{'Si': 4.0, 'O': 8.0}	12	2.22	179.50	30	19	5.64	1.92	2.65
mp-11457	{'Hf': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	13.28	35.19	26	179	0.00	2.14	2.65
mp-12665	{'Be': 12.0, 'Ag': 1.0}	13	3.10	115.55	32	113	0.00	1.70	2.65
mp-985551	{'Ce': 1.0, 'Y': 3.0}	4	5.37	125.71	20	40	0.00	1.91	2.64
mp-998988	{'Ti': 3.0, 'Ga': 1.0}	4	5.42	65.40	27	108	0.00	2.16	2.64
mp-999336	{'Nd': 2.0, 'Pd': 2.0}	4	8.42	98.91	25	69	0.00	1.95	2.64
mp-864937	{'Mg': 6.0, 'Sc': 2.0}	8	2.13	183.65	22	43	0.00	1.95	2.64
mp-978277	{'Mg': 3.0, 'Cr': 1.0}	4	2.51	82.59	18	48	0.00	2.00	2.64
mp-10128	{'Th': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	9.01	139.13	31	84	0.00	1.95	2.64
mp-1628	{'Te': 2.0, 'Rh': 2.0}	4	9.36	81.76	35	129	0.00	2.35	2.64
mp-10598	{'Cu': 2.0, 'Sn': 2.0}	4	7.87	76.95	34	77	0.00	2.36	2.64
mp-2670	{'Nb': 6.0, 'Ga': 2.0}	8	8.28	139.72	43	165	0.00	2.20	2.63
mp-21294	{'Y': 4.0, 'In': 2.0}	6	5.67	171.41	26	53	0.00	1.98	2.63
mp-1025551	{'Ga': 4.0, 'Pt': 4.0}	8	14.30	122.98	52	156	0.00	2.17	2.63
mp-22862	{'Na': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	2.11	46.10	14	23	5.15	2.20	2.63
mp-867815	{'Ac': 2.0, 'Ga': 6.0}	8	7.60	190.70	39	52	0.00	2.17	2.62
mp-617	{'Pt': 1.0, 'O': 2.0}	3	9.20	40.99	32	48	1.51	2.25	2.62
mp-1857	{'Yb': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	8.56	55.36	17	32	0.00	1.86	2.61
mp-1008901	{'Mg': 1.0, 'H': 2.0}	3	1.62	27.00	13	60	0.00	1.67	2.61
mp-2706	{'Sn': 1.0, 'F': 4.0}	5	4.47	72.35	30	36	3.20	2.20	2.60
mp-1018103	{'Zr': 1.0, 'Au': 2.0}	3	13.95	57.75	36	157	0.00	2.38	2.60
mp-510436	{'In': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.88	66.27	35	141	0.00	2.22	2.60
mp-399	{'Te': 2.0, 'Pt': 1.0}	3	9.65	77.52	28	49	0.00	2.26	2.60
mp-888	{'Ca': 6.0, 'As': 6.0}	12	3.57	321.32	29	48	0.00	1.89	2.60
mp-1239	{'Sb': 12.0, 'Ir': 4.0}	16	8.93	414.58	60	99	0.53	2.32	2.60
mp-1018940	{'Pr': 2.0, 'Se': 4.0}	6	6.53	151.97	28	70	0.00	2.00	2.60
mp-1377	{'Th': 1.0, 'Cu': 2.0}	3	10.28	58.02	30	50	0.00	2.23	2.59
mp-867317	{'Cu': 6.0, 'Si': 2.0}	8	7.58	95.79	50	141	0.00	2.36	2.59
mp-2330	{'Nb': 4.0, 'Se': 6.0}	10	6.76	207.77	42	69	0.00	2.17	2.59
mp-1882	{'Ca': 1.0, 'Cu': 5.0}	6	6.54	90.89	38	91	0.00	2.29	2.59
mp-30365	{'Be': 4.0, 'Au': 4.0}	8	12.98	105.39	41	148	0.00	1.83	2.58
mp-640708	{'Fe': 8.0, 'Ge': 16.0}	24	7.59	351.81	68	125	0.00	2.14	2.58
mp-11363	{'Tb': 1.0, 'Cu': 5.0}	6	8.84	89.51	42	98	0.00	2.28	2.58
mp-669692	{'Nb': 6.0, 'Pd': 18.0}	24	10.83	379.19	79	196	0.00	2.22	2.58
mp-31404	{'Mg': 5.0, 'Si': 6.0}	11	2.41	200.10	26	210	0.00	1.90	2.58
mp-30766	{'Li': 5.0, 'Sn': 2.0}	7	3.56	127.08	23	31	0.00	1.78	2.58
mp-976138	{'Pr': 1.0, 'Dy': 3.0}	4	8.00	130.45	24	38	0.00	2.01	2.58
mp-241	{'Cd': 1.0, 'F': 2.0}	3	6.03	41.43	28	97	3.07	2.31	2.58
mp-27840	{'Cr': 3.0, 'Se': 4.0}	7	5.58	140.46	34	66	0.00	2.19	2.57
mp-11290	{'Ca': 1.0, 'Sn': 3.0}	4	6.03	109.13	26	43	0.00	2.22	2.57
mp-979984	{'Yb': 1.0, 'P': 3.0}	4	6.47	68.23	24	75	0.00	1.93	2.57
mp-1429	{'Sm': 1.0, 'Co': 5.0}	6	8.72	84.70	41	144	0.00	2.25	2.57
mp-1266	{'Na': 2.0, 'Se': 1.0}	3	2.58	80.48	15	26	2.28	2.01	2.56
mp-16526	{'Al': 4.0, 'Pt': 8.0}	12	15.42	179.72	58	205	0.00	2.05	2.56

mp-2824	{'Al': 4.0, 'Pd': 8.0}	12	8.98	177.33	51	158	0.00	2.12	2.56
mp-971694	{'Ge': 12.0, 'N': 8.0}	20	4.59	356.04	53	99	0.53	2.22	2.56
mp-31205	{'Zr': 6.0, 'Fe': 2.0}	8	6.81	160.73	36	104	0.00	2.10	2.56
mvc-11115	{'Ti': 4.0, 'O': 8.0}	12	3.55	149.48	36	88	2.46	2.00	2.55
mp-2618	{'Dy': 1.0, 'Ag': 2.0}	3	9.62	65.27	30	74	0.00	2.34	2.55
mp-11883	{'Mg': 4.0, 'Ir': 8.0}	12	13.65	198.90	58	196	0.00	2.15	2.55
mp-237	{'Tm': 1.0, 'Te': 1.0}	2	8.77	56.15	17	60	0.00	1.90	2.54
mp-1317	{'Co': 4.0, 'Sb': 12.0}	16	7.44	378.68	57	85	0.58	2.32	2.54
mp-985278	{'Ac': 1.0, 'F': 3.0}	4	8.52	55.33	33	120	6.21	2.21	2.54
mp-1007776	{'Tl': 1.0, 'P': 1.0}	2	6.82	57.31	20	14	0.13	2.21	2.54
mp-569600	{'Ge': 3.0, 'As': 4.0}	7	5.13	167.58	29	47	0.17	2.06	2.54
mp-971911	{'Zn': 2.0, 'N': 2.0}	4	5.43	48.53	25	126	0.00	1.98	2.54
mp-504659	{'Hf': 24.0, 'P': 12.0}	36	11.59	667.27	76	149	0.00	1.93	2.54
mp-1416	{'Nb': 1.0, 'F': 4.0}	5	3.72	75.38	28	31	0.00	2.22	2.54
mp-1558	{'Sr': 2.0, 'Pd': 4.0}	6	7.96	125.35	33	80	0.00	2.10	2.54
mp-976419	{'Hf': 3.0, 'Bi': 1.0}	4	13.43	92.08	28	101	0.00	1.91	2.53
mp-2361	{'Hf': 10.0, 'Al': 6.0}	16	9.93	325.42	48	111	0.00	1.89	2.53
mp-594	{'Ni': 2.0, 'S': 2.0}	4	5.68	53.06	18	136	0.00	1.51	2.53
mp-339	{'U': 2.0, 'Mn': 4.0}	6	13.11	88.14	39	135	0.00	2.00	2.53
mp-981215	{'Zn': 3.0, 'Co': 1.0}	4	8.14	52.05	32	87	0.00	2.17	2.53
mp-570199	{'Ti': 3.0, 'Pd': 5.0}	8	8.90	126.01	44	162	0.00	2.21	2.52
mp-984796	{'Ba': 1.0, 'Th': 3.0}	4	9.81	141.05	24	37	0.00	1.96	2.52
mp-715572	{'Fe': 16.0, 'O': 24.0}	40	4.94	429.69	79	178	1.86	2.17	2.52
mp-1018102	{'Zr': 1.0, 'Pd': 2.0}	3	9.55	52.85	29	145	0.00	2.25	2.52
mp-542854	{'Mg': 18.0, 'Si': 10.0}	28	2.17	548.64	38	59	0.00	1.91	2.52
mp-747	{'Ba': 2.0, 'Pt': 4.0}	6	13.27	131.99	38	103	0.00	2.09	2.52
mp-20920	{'Tb': 1.0, 'In': 3.0}	4	8.24	101.38	27	51	0.00	2.12	2.52
mp-2784	{'Na': 2.0, 'Te': 1.0}	3	2.93	98.48	15	10	2.28	1.98	2.52
mvc-6477	{'Ni': 4.0, 'O': 8.0}	12	5.00	120.60	47	82	0.00	2.16	2.51
mp-1250	{'Lu': 4.0, 'In': 2.0}	6	9.66	159.74	32	59	0.00	2.04	2.51
mp-15964	{'Hf': 12.0, 'Sb': 4.0}	16	12.13	359.85	49	114	0.00	1.87	2.51
mp-12761	{'Be': 1.0, 'Au': 2.0}	3	15.14	44.19	30	137	0.00	2.01	2.50
mp-567510	{'Ba': 1.0, 'Sn': 2.0}	3	5.64	110.28	18	33	0.04	2.02	2.50
mp-625	{'Mg': 12.0, 'Ru': 8.0}	20	5.41	337.82	51	107	0.00	2.09	2.50
mp-30933	{'Zr': 6.0, 'Bi': 6.0}	12	9.71	307.89	46	84	0.00	2.11	2.50
mvc-4274	{'Bi': 4.0, 'O': 8.0}	12	6.54	244.86	44	55	0.00	2.15	2.50
mp-861910	{'Sc': 6.0, 'Hg': 2.0}	8	6.10	182.77	34	66	0.00	2.13	2.50
mp-638	{'Sr': 1.0, 'Zn': 5.0}	6	5.99	114.99	30	53	0.00	2.08	2.50
mp-556911	{'Fe': 2.0, 'F': 4.0}	6	4.07	76.62	33	97	1.74	2.30	2.50
mp-697	{'Sn': 4.0, 'O': 8.0}	12	7.22	138.61	60	100	0.59	2.39	2.49
mp-20847	{'Ti': 10.0, 'Sn': 6.0}	16	6.43	307.79	49	107	0.00	2.14	2.49
mp-1001790	{'Li': 1.0, 'O': 3.0}	4	2.13	42.83	20	34	0.09	2.07	2.49
mp-20465	{'As': 8.0, 'Pd': 4.0}	12	7.55	225.48	49	107	0.00	2.24	2.49
mp-2222	{'Mn': 1.0, 'Hg': 1.0}	2	11.48	36.96	25	113	0.00	2.23	2.48
mp-9983	{'Ta': 4.0, 'Se': 6.0}	10	9.71	204.89	44	81	0.00	2.10	2.48
mp-975638	{'Pr': 3.0, 'Hf': 1.0}	4	7.85	127.23	23	41	0.00	1.99	2.48
mp-474	{'Er': 2.0, 'Fe': 4.0}	6	9.86	93.97	36	76	0.00	2.05	2.48
mp-1013528	{'Ba': 3.0, 'N': 2.0}	5	4.72	154.77	22	39	0.00	2.02	2.48
mp-17045	{'Hf': 6.0, 'Rh': 10.0}	16	13.21	264.01	67	194	0.00	2.21	2.47
mp-1028	{'V': 3.0, 'Te': 4.0}	7	6.50	169.39	33	53	0.00	2.16	2.47
mp-559931	{'V': 2.0, 'F': 6.0}	8	3.23	110.86	31	24	1.64	2.11	2.47

mp-972456	{'Sm': 3.0, 'V': 1.0}	4	7.24	115.17	22	40	0.00	1.94	2.47
mp-775906	{'Y': 16.0, 'O': 24.0}	40	5.10	587.84	65	139	4.39	1.98	2.47
mp-2424	{'La': 1.0, 'Zn': 5.0}	6	6.97	111.05	31	71	0.00	2.06	2.47
mp-1018734	{'Ir': 3.0, 'N': 3.0}	6	14.86	69.13	49	225	0.00	2.23	2.46
mp-567290	{'La': 2.0, 'N': 2.0}	4	5.76	88.16	22	86	1.15	1.99	2.46
mp-570707	{'Nd': 4.0, 'Se': 8.0}	12	6.62	303.32	36	63	0.00	1.95	2.46
mp-21202	{'Sm': 3.0, 'In': 1.0}	4	7.79	120.59	22	41	0.00	1.92	2.46
mp-11230	{'Y': 8.0, 'Al': 4.0}	12	4.24	320.74	30	55	0.00	1.92	2.46
mp-350	{'Zr': 5.0, 'Te': 4.0}	9	7.00	229.20	36	67	0.00	2.12	2.46
mp-562	{'Sb': 8.0, 'Pt': 4.0}	12	10.37	280.86	54	104	0.00	2.31	2.45
mp-22447	{'Zr': 24.0, 'P': 8.0}	32	6.38	634.45	64	125	0.00	2.10	2.45
mp-1009222	{'Mn': 1.0, 'Te': 1.0}	2	4.64	65.39	15	20	0.00	2.08	2.45
mp-20466	{'Sn': 7.0, 'Ir': 5.0}	12	12.07	246.47	58	135	0.00	2.31	2.45
mp-983497	{'Pa': 3.0, 'Zn': 1.0}	4	13.74	91.66	29	92	0.00	1.98	2.44
mp-11567	{'Sc': 1.0, 'Zn': 12.0}	13	6.86	200.86	48	81	0.00	2.15	2.44
mp-862899	{'Pm': 1.0, 'Cd': 3.0}	4	8.24	97.17	23	58	0.00	1.91	2.44
mp-1424	{'Ge': 4.0, 'Pd': 4.0}	8	8.92	133.27	45	123	0.00	2.29	2.43
mp-29661	{'Si': 10.0, 'Pt': 12.0}	22	12.65	344.30	69	181	0.00	2.06	2.43
mp-976322	{'Li': 3.0, 'Pt': 1.0}	4	6.38	56.18	21	59	0.00	1.72	2.43
mp-669546	{'Al': 13.0, 'Pd': 13.0}	26	7.54	381.94	64	150	0.00	2.07	2.43
mp-7498	{'Ti': 5.0, 'Te': 4.0}	9	6.39	194.96	36	66	0.00	2.12	2.43
mp-1328	{'Sr': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	8.28	117.75	34	126	0.00	2.16	2.43
mp-974799	{'Rb': 3.0, 'Sr': 1.0}	4	1.79	318.42	12	15	0.00	2.07	2.43
mvc-11233	{'Co': 1.0, 'S': 2.0}	3	3.23	63.35	19	71	0.00	2.25	2.42
mp-12802	{'Al': 2.0, 'Cu': 6.0}	8	7.29	99.17	46	133	0.00	2.33	2.42
mp-19128	{'Co': 4.0, 'O': 4.0}	8	5.10	97.64	33	130	0.71	2.01	2.42
mp-1513	{'Co': 9.0, 'S': 8.0}	17	5.55	235.62	64	130	0.00	2.49	2.42
mp-567653	{'Ti': 6.0, 'Ni': 8.0}	14	6.85	183.55	37	163	0.00	1.69	2.42
mp-569535	{'Ca': 4.0, 'Bi': 2.0}	6	4.74	202.42	23	31	0.05	2.01	2.41
mp-30358	{'Tb': 1.0, 'Ag': 2.0}	3	9.41	66.13	28	74	0.00	2.31	2.41
mp-11584	{'Lu': 8.0, 'Te': 1.0}	9	9.72	261.00	35	54	0.00	1.97	2.41
mp-1009746	{'Sc': 1.0, 'P': 1.0}	2	2.41	52.25	11	42	1.68	1.92	2.41
mp-560902	{'Mn': 2.0, 'F': 4.0}	6	3.74	82.44	30	85	2.54	2.25	2.41
mp-9946	{'Zn': 6.0, 'S': 6.0}	12	4.00	243.04	33	70	2.03	2.02	2.41
mp-555280	{'Zn': 6.0, 'S': 6.0}	12	3.99	243.29	33	69	2.07	2.02	2.41
mp-567116	{'Yb': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	12.53	36.33	23	68	0.00	2.08	2.41
mp-1407	{'Rh': 3.0, 'Se': 8.0}	11	7.02	222.50	47	77	0.00	2.32	2.41
mp-1501	{'Al': 6.0, 'Pt': 10.0}	16	14.71	238.56	62	199	0.00	2.04	2.40
mp-12701	{'Nd': 2.0, 'Sn': 4.0}	6	7.51	168.86	29	53	0.00	2.08	2.40
mp-20800	{'Zr': 4.0, 'In': 8.0}	12	7.83	272.17	44	83	0.00	2.16	2.40
mp-1046	{'Nb': 4.0, 'Sn': 8.0}	12	7.98	274.85	49	96	0.00	2.31	2.40
mp-755894	{'Li': 8.0, 'O': 4.0}	12	2.07	96.00	30	62	5.24	1.90	2.40
mp-976356	{'Nd': 2.0, 'Sc': 6.0}	8	4.25	218.07	24	40	0.00	1.88	2.39
mp-715482	{'Mo': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.59	185.05	38	75	0.96	2.08	2.39
mp-7947	{'Pt': 2.0, 'O': 2.0}	4	13.11	53.46	39	186	0.00	2.30	2.39
mp-8354	{'La': 2.0, 'F': 6.0}	8	5.79	112.32	37	168	5.74	2.19	2.38
mp-11576	{'Yb': 1.0, 'Tl': 1.0}	2	10.90	57.51	20	33	0.00	2.08	2.38
mp-976334	{'Li': 3.0, 'Tc': 1.0}	4	3.30	59.72	18	36	0.00	1.85	2.38
mp-29973	{'Sr': 4.0, 'N': 4.0}	8	3.85	175.12	26	39	0.00	1.98	2.38
mp-15951	{'Be': 3.0, 'F': 6.0}	9	2.22	105.36	25	20	8.32	1.88	2.38
mp-980200	{'Zn': 6.0, 'Rh': 2.0}	8	8.78	113.17	43	128	0.00	2.20	2.38

mp-8884	{'Zn': 2.0, 'Te': 2.0}	4	5.41	118.49	22	43	1.10	2.13	2.38
mp-13033	{'Mg': 1.0, 'Te': 1.0}	2	3.65	69.06	12	33	2.32	1.94	2.38
mp-1336	{'Pd': 2.0, 'O': 2.0}	4	7.79	52.16	34	159	0.00	2.35	2.37
mp-760432	{'Cu': 4.0, 'O': 6.0}	10	5.56	104.61	45	93	0.14	2.24	2.37
mp-864889	{'Zr': 2.0, 'Zn': 6.0}	8	7.25	131.76	39	100	0.00	2.20	2.37
mp-10213	{'Y': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	5.85	132.89	26	58	0.00	1.99	2.36
mp-1159	{'Zr': 4.0, 'Fe': 2.0}	6	7.00	113.03	32	124	0.00	2.17	2.36
mp-867158	{'Sm': 1.0, 'Cd': 3.0}	4	8.40	96.37	23	57	0.00	1.93	2.36
mp-567276	{'Ta': 2.0, 'V': 4.0}	6	10.39	90.44	39	201	0.00	2.20	2.36
mp-567982	{'Ta': 4.0, 'Sn': 8.0}	12	10.17	273.24	50	103	0.00	2.24	2.36
mp-2652	{'Y': 16.0, 'O': 24.0}	40	4.89	613.19	62	138	4.11	2.00	2.36
mp-1014373	{'Cr': 2.0, 'N': 4.0}	6	2.09	126.95	20	102	0.00	2.12	2.36
mp-2600	{'Ba': 1.0, 'Te': 1.0}	2	5.68	77.44	14	33	1.73	2.00	2.35
mp-404	{'Mn': 2.0, 'Te': 2.0}	4	6.61	91.71	23	46	0.00	2.03	2.35
mp-568232	{'Ti': 12.0, 'Sn': 10.0}	22	6.73	434.60	56	102	0.00	2.16	2.35
mp-7568	{'Th': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	8.82	179.00	30	73	0.00	2.10	2.35
mp-20432	{'Fe': 4.0, 'Ge': 2.0}	6	8.26	74.09	36	138	0.00	2.13	2.35
mp-571589	{'Mo': 2.0, 'C': 1.0}	3	8.56	39.53	25	213	0.00	2.06	2.34
mp-29941	{'Sc': 2.0, 'C': 1.0}	3	3.12	54.28	15	74	0.00	1.90	2.34
mp-30619	{'Zr': 6.0, 'Co': 2.0}	8	6.92	159.74	34	104	0.00	2.10	2.34
mp-1025448	{'Y': 4.0, 'Pt': 4.0}	8	10.49	179.81	35	108	0.00	1.98	2.34
mp-22704	{'Y': 1.0, 'In': 1.0}	2	6.29	53.77	16	56	0.00	2.05	2.33
mp-12884	{'Hf': 5.0, 'Te': 4.0}	9	10.62	219.35	36	76	0.00	1.95	2.33
mp-2313	{'Mg': 1.0, 'In': 1.0}	2	4.89	47.21	15	40	0.00	2.02	2.33
mp-1730	{'Ba': 2.0, 'Ge': 2.0}	4	5.15	135.45	18	31	0.00	1.92	2.33
mp-865373	{'Y': 2.0, 'Co': 2.0}	4	5.42	90.58	22	54	0.00	2.07	2.32
mp-11307	{'Mg': 2.0, 'Cd': 2.0}	4	5.24	86.60	20	43	0.00	1.93	2.32
mp-10162	{'La': 6.0, 'Si': 4.0}	10	5.62	279.36	28	58	0.00	1.87	2.32
mvc-4607	{'Mo': 4.0, 'O': 10.0}	14	4.28	211.18	39	111	0.80	2.09	2.32
mp-2517	{'Ca': 8.0, 'Si': 4.0}	12	2.17	332.05	22	37	0.29	1.85	2.32
mp-1725	{'Ca': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	4.42	128.53	24	45	0.00	2.01	2.32
mp-22498	{'Cr': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	6.90	142.26	32	62	0.00	2.25	2.32
mp-7931	{'Sr': 6.0, 'P': 6.0}	12	3.44	343.82	27	45	0.75	1.94	2.31
mp-809	{'Th': 1.0, 'Co': 5.0}	6	10.29	85.01	41	131	0.00	2.27	2.31
mp-1341	{'Te': 4.0, 'Rh': 6.0}	10	10.12	185.07	49	147	0.00	2.30	2.30
mp-973024	{'La': 3.0, 'Hf': 1.0}	4	7.70	128.42	21	39	0.00	1.94	2.30
mp-981232	{'Ti': 3.0, 'Nb': 1.0}	4	5.59	70.26	25	122	0.00	2.19	2.30
mp-1111	{'Mn': 10.0, 'Si': 6.0}	16	6.05	197.14	46	148	0.00	2.02	2.29
mp-527	{'Ba': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	5.29	78.39	13	23	0.00	1.95	2.28
mp-2395	{'Sb': 12.0, 'Rh': 4.0}	16	7.53	412.89	52	89	0.23	2.33	2.28
mp-20382	{'Ti': 12.0, 'Sn': 10.0}	22	6.81	429.31	55	105	0.00	2.16	2.28
mp-1008524	{'Be': 2.0, 'Se': 2.0}	4	4.90	59.68	19	93	0.63	1.80	2.27
mp-570196	{'Zr': 10.0, 'Sb': 8.0}	18	7.74	404.74	48	106	0.00	2.08	2.27
mp-22868	{'Bi': 2.0, 'Rh': 2.0}	4	12.36	83.81	30	104	0.00	2.14	2.26
mp-568172	{'Ca': 9.0, 'N': 6.0}	15	2.81	262.88	30	68	1.58	1.92	2.26
mp-1006112	{'Na': 3.0, 'Co': 1.0}	4	2.16	98.49	15	9	0.00	1.95	2.26
mp-567750	{'Sc': 4.0, 'Ru': 8.0}	12	8.26	198.65	49	190	0.00	2.27	2.25
mp-21104	{'Hf': 10.0, 'Sn': 6.0}	16	11.69	354.79	47	113	0.00	1.93	2.25
mp-1007770	{'Tl': 1.0, 'As': 1.0}	2	7.21	64.31	18	39	0.00	2.24	2.25
mp-877	{'Er': 4.0, 'In': 2.0}	6	9.01	165.62	27	59	0.00	1.95	2.25
mp-973689	{'Ho': 6.0, 'Lu': 2.0}	8	9.00	247.17	29	43	0.00	1.89	2.25

mp-31467	{'Ga': 3.0, 'Pd': 7.0}	10	10.44	151.71	49	149	0.00	2.24	2.25
mp-636334	{'Sn': 4.0, 'Rh': 8.0}	12	11.00	196.03	55	177	0.00	2.29	2.25
mp-672232	{'Al': 1.0, 'Ni': 3.0}	4	7.45	45.27	16	180	0.00	1.27	2.24
mp-1009533	{'Pd': 1.0, 'C': 1.0}	2	8.99	21.88	22	175	0.00	2.10	2.24
mp-30840	{'Ti': 4.0, 'Pd': 6.0}	10	8.74	157.72	44	157	0.00	2.19	2.23
mp-867189	{'Pm': 3.0, 'Pb': 1.0}	4	8.62	123.70	21	44	0.00	1.91	2.23
mp-2666	{'Cr': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	7.98	122.95	33	85	0.00	2.23	2.23
mp-1011377	{'Ce': 2.0, 'Se': 4.0}	6	6.20	159.76	24	59	0.00	1.96	2.23
mp-9588	{'Li': 8.0, 'P': 8.0}	16	2.00	251.28	27	41	0.85	1.86	2.22
mp-972042	{'Zn': 6.0, 'Cu': 2.0}	8	7.84	109.97	40	96	0.00	2.20	2.22
mp-1912	{'Zn': 1.0, 'Ag': 1.0}	2	8.85	32.50	23	91	0.00	2.30	2.22
mp-567590	{'Lu': 4.0, 'Os': 8.0}	12	17.44	211.53	59	215	0.00	2.21	2.22
mp-973266	{'Lu': 6.0, 'Al': 2.0}	8	9.08	201.86	31	55	0.00	1.94	2.21
mp-2459	{'Yb': 1.0, 'In': 1.0}	2	8.50	56.21	17	39	0.00	2.04	2.21
mp-755263	{'Cr': 1.0, 'S': 2.0}	3	3.36	57.38	18	29	0.00	2.18	2.21
mp-2293	{'Mn': 1.0, 'Se': 1.0}	2	4.23	52.58	13	55	0.05	1.98	2.21
mp-684679	{'Sb': 12.0, 'O': 26.0}	38	5.47	569.43	71	119	1.35	2.22	2.21
mp-2510	{'Zr': 1.0, 'Hg': 1.0}	2	11.19	43.31	24	102	0.00	2.35	2.21
mp-1909	{'La': 2.0, 'Mg': 4.0}	6	3.68	169.35	19	36	0.00	1.90	2.20
mp-2826	{'Lu': 4.0, 'S': 6.0}	10	6.20	239.01	31	77	2.66	1.98	2.20
mp-1018042	{'U': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	13.21	56.18	20	75	0.00	2.09	2.19
mp-976023	{'Li': 3.0, 'Ga': 1.0}	4	2.36	63.75	14	26	0.00	1.74	2.19
mp-11467	{'Nd': 1.0, 'Hg': 1.0}	2	10.09	56.77	17	56	0.00	1.98	2.19
mp-30083	{'Tl': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	10.79	63.60	21	34	0.00	2.28	2.18
mp-10889	{'La': 3.0, 'Al': 1.0}	4	5.98	123.25	18	40	0.00	1.89	2.18
mp-8454	{'K': 1.0, 'F': 1.0}	2	2.79	34.61	16	21	6.64	2.34	2.18
mp-754	{'Te': 8.0, 'Rh': 4.0}	12	8.50	279.98	48	97	0.00	2.35	2.18
mp-997616	{'Ba': 1.0, 'C': 1.0}	2	4.55	54.47	12	38	0.00	1.85	2.18
mvc-14047	{'Mn': 1.0, 'S': 2.0}	3	2.77	71.42	16	19	0.00	2.18	2.17
mp-975664	{'Nd': 1.0, 'Ge': 3.0}	4	7.06	85.17	22	23	0.00	1.95	2.17
mp-11025	{'Zn': 8.0, 'P': 16.0}	24	3.49	484.82	42	68	1.47	2.08	2.17
mp-19871	{'Pb': 2.0, 'Au': 4.0}	6	14.82	134.70	37	76	0.00	2.14	2.17
mp-542488	{'Mg': 12.0, 'Co': 12.0}	24	4.53	365.89	49	77	0.00	2.09	2.17
mvc-6615	{'Bi': 4.0, 'O': 8.0}	12	8.38	190.91	45	123	0.00	2.15	2.17
mp-1769	{'Sb': 2.0, 'Pd': 2.0}	4	8.97	84.49	29	104	0.00	2.29	2.16
mp-1551	{'Te': 6.0, 'Ir': 3.0}	9	10.04	221.97	43	76	0.00	2.32	2.16
mp-977165	{'Li': 6.0, 'Co': 2.0}	8	2.46	107.51	21	14	0.00	1.78	2.16
mp-1434	{'Mo': 1.0, 'S': 2.0}	3	4.24	62.65	18	27	1.58	2.12	2.15
mp-862755	{'Pr': 1.0, 'Cd': 3.0}	4	7.96	99.76	22	58	0.00	1.99	2.15
mp-7583	{'Si': 2.0, 'S': 4.0}	6	2.20	138.94	19	24	3.34	2.09	2.15
mp-647924	{'Eu': 6.0, 'O': 9.0}	15	7.56	231.92	44	106	0.00	2.01	2.15
mp-12742	{'Mg': 2.0, 'Pd': 6.0}	8	9.07	125.74	39	130	0.00	2.18	2.15
mp-2068	{'Rh': 2.0, 'F': 6.0}	8	5.29	100.31	34	54	0.89	2.14	2.15
mp-9813	{'W': 1.0, 'S': 2.0}	3	6.56	62.80	20	27	1.62	2.06	2.14
mp-1540	{'Ho': 1.0, 'Tl': 1.0}	2	11.28	54.38	19	59	0.00	2.10	2.14
mp-11468	{'Nd': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	11.61	78.01	23	52	0.00	2.08	2.14
mp-976863	{'Na': 1.0, 'Tm': 3.0}	4	7.27	120.93	19	33	0.00	1.87	2.14
mp-30354	{'Sc': 1.0, 'Ag': 4.0}	5	8.59	92.11	37	92	0.00	2.49	2.14
mp-17639	{'Y': 2.0, 'Zn': 17.0}	19	6.96	307.52	51	81	0.00	2.13	2.14
mp-22568	{'V': 6.0, 'Ga': 2.0}	8	6.73	109.88	38	168	0.00	2.26	2.13
mp-522	{'Cu': 1.0, 'Au': 1.0}	2	14.40	30.04	28	135	0.00	2.37	2.13

mp-20901	{'Ni': 4.0, 'Se': 8.0}	12	6.88	209.15	38	77	0.00	2.03	2.13
mp-31337	{'In': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.89	66.21	31	69	0.00	2.22	2.13
mp-30739	{'Mg': 6.0, 'Ir': 2.0}	8	5.84	150.68	28	77	0.00	1.96	2.13
mp-978856	{'Sr': 1.0, 'H': 3.0}	4	3.27	46.03	16	51	0.00	1.72	2.13
mp-985300	{'Ac': 1.0, 'Er': 3.0}	4	8.91	135.83	21	37	0.00	1.97	2.13
mp-2432	{'Ca': 4.0, 'Mg': 8.0}	12	1.73	340.13	19	30	0.00	1.84	2.13
mp-570050	{'Yb': 4.0, 'Sn': 2.0}	6	8.77	175.97	26	35	0.00	1.96	2.13
mp-776952	{'Na': 6.0, 'O': 3.0}	9	2.51	123.22	25	47	1.51	2.02	2.13
mp-1025069	{'Pr': 2.0, 'Sn': 4.0}	6	7.34	171.16	28	51	0.00	2.17	2.12
mp-16523	{'Al': 6.0, 'Pd': 10.0}	16	8.61	236.35	50	156	0.00	2.11	2.12
mp-1039368	{'Ca': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	1.63	65.49	8	20	0.00	1.83	2.12
mp-30861	{'Pu': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	10.85	114.77	33	44	0.00	2.08	2.12
mp-600428	{'Mn': 12.0, 'Sn': 8.0}	20	7.81	342.02	55	75	0.00	2.17	2.11
mp-217	{'Er': 1.0, 'Tl': 1.0}	2	11.47	53.80	19	52	0.00	2.10	2.11
mp-435	{'Th': 1.0, 'Sn': 3.0}	4	9.02	108.27	25	101	0.00	2.18	2.11
mp-7904	{'Cd': 2.0, 'P': 8.0}	10	3.72	211.19	28	55	0.53	2.08	2.11
mp-2340	{'Na': 6.0, 'O': 6.0}	12	2.52	153.91	29	49	1.77	2.03	2.11
mp-976061	{'Pr': 1.0, 'Ge': 3.0}	4	6.88	86.64	22	17	0.00	1.99	2.10
mp-1521	{'Sb': 14.0, 'Mo': 6.0}	20	8.39	451.37	55	110	0.00	2.25	2.10
mp-632319	{'Cs': 1.0, 'H': 1.0}	2	3.87	57.45	11	26	2.96	1.84	2.10
mp-979074	{'Tm': 1.0, 'O': 3.0}	4	8.57	42.03	29	163	0.00	2.12	2.10
mp-2646	{'Mg': 3.0, 'Sb': 2.0}	5	3.94	133.47	18	42	0.16	1.94	2.09
mp-11499	{'Y': 4.0, 'Mg': 8.0}	12	2.92	312.89	23	43	0.00	1.86	2.09
mp-1146	{'Th': 4.0, 'S': 8.0}	12	7.27	270.68	34	90	1.03	1.95	2.09
mp-21359	{'Sb': 4.0, 'Rh': 8.0}	12	10.94	198.80	51	169	0.00	2.26	2.09
mp-22050	{'Hf': 4.0, 'In': 10.0}	14	9.28	333.17	45	72	0.00	2.15	2.08
mp-865798	{'Ga': 2.0, 'Cu': 6.0}	8	8.65	99.92	47	127	0.00	2.43	2.08
mp-568337	{'Th': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	12.47	116.64	35	170	0.00	2.16	2.08
mp-2039	{'Sc': 4.0, 'Mn': 8.0}	12	6.16	167.04	38	166	0.00	2.06	2.08
mp-2691	{'Cd': 1.0, 'Se': 1.0}	2	5.30	59.95	15	45	0.51	2.18	2.08
mp-865400	{'Th': 2.0, 'Pt': 6.0}	8	17.74	153.03	43	181	0.00	2.09	2.08
mp-900	{'Rh': 2.0, 'Se': 2.0}	4	8.66	69.76	29	136	0.00	2.29	2.08
mp-865583	{'Y': 4.0, 'Mg': 2.0}	6	3.82	175.71	18	41	0.00	1.87	2.07
mvc-2949	{'Sb': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.77	214.21	37	73	1.54	2.21	2.07
mp-865856	{'Pa': 1.0, 'Bi': 3.0}	4	12.10	117.71	26	68	0.00	2.13	2.07
mp-1008702	{'Ti': 2.0, 'In': 1.0}	3	5.07	68.98	18	49	0.00	2.12	2.07
mp-983539	{'Be': 1.0, 'Au': 3.0}	4	15.43	64.56	33	145	0.00	2.18	2.07
mp-569125	{'Mg': 3.0, 'In': 1.0}	4	3.43	90.94	16	42	0.00	1.95	2.07
mp-974882	{'Rb': 3.0, 'Mo': 1.0}	4	2.48	236.36	13	0	0.00	1.95	2.07
mp-1018732	{'Ho': 2.0, 'Te': 4.0}	6	7.98	174.79	25	59	0.00	2.00	2.06
mp-19724	{'Cu': 6.0, 'Ge': 2.0}	8	8.55	102.26	43	123	0.00	2.32	2.06
mp-11252	{'Mn': 1.0, 'Au': 2.0}	3	14.57	51.17	30	124	0.00	2.27	2.06
mp-981749	{'Tc': 1.0, 'Ag': 3.0}	4	9.95	70.33	34	110	0.00	2.47	2.06
mp-16723	{'Y': 12.0, 'Al': 8.0}	20	4.09	520.45	33	58	0.00	1.90	2.06
mp-975905	{'Mo': 3.0, 'I': 1.0}	4	9.89	69.62	28	168	0.00	2.19	2.06
mp-981210	{'Tl': 3.0, 'V': 1.0}	4	10.82	101.94	27	102	0.00	2.21	2.06
mp-30790	{'Zr': 2.0, 'Mo': 6.0}	8	8.92	141.10	36	196	0.00	2.16	2.06
mp-21143	{'Ce': 1.0, 'P': 1.0}	2	6.61	43.00	15	84	0.00	1.98	2.06
mp-1025565	{'Ho': 2.0, 'O': 6.0}	8	5.70	124.03	30	74	0.22	2.05	2.05
mp-672287	{'Li': 26.0, 'Si': 8.0}	34	1.28	524.13	28	32	0.00	1.69	2.05
mp-2845	{'Sb': 2.0, 'Pt': 2.0}	4	12.28	85.72	30	124	0.00	2.25	2.05

mp-1009538	{'Pd': 1.0, 'C': 1.0}	2	7.46	26.35	19	178	0.00	2.12	2.05
mp-767	{'Yb': 3.0, 'Ge': 5.0}	8	8.14	179.93	29	26	0.00	1.90	2.05
mp-7384	{'Sm': 4.0, 'F': 12.0}	16	6.51	211.55	48	112	7.86	2.17	2.05
mp-20686	{'Ho': 4.0, 'In': 2.0}	6	8.82	167.40	25	55	0.00	1.95	2.04
mp-972549	{'Sm': 2.0, 'Lu': 6.0}	8	9.14	245.28	28	43	0.00	1.93	2.04
mp-1018679	{'Dy': 2.0, 'Te': 4.0}	6	7.92	175.18	25	59	0.00	2.02	2.04
mp-981252	{'Y': 1.0, 'Mg': 5.0}	6	2.36	147.79	16	23	0.00	1.88	2.04
mp-569752	{'U': 2.0, 'Pt': 2.0}	4	16.17	88.96	26	123	0.00	1.92	2.03
mp-2611	{'Ba': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	5.40	173.66	22	36	0.00	2.01	2.03
mp-19819	{'Gd': 1.0, 'In': 1.0}	2	8.30	54.44	16	59	0.00	2.05	2.03
mp-30878	{'Tb': 1.0, 'Tl': 1.0}	2	10.85	55.58	18	55	0.00	2.10	2.03
mp-21477	{'Rb': 1.0, 'In': 4.0}	5	5.47	165.26	25	21	0.00	2.33	2.03
mp-19962	{'Sn': 2.0, 'Pt': 1.0}	3	10.20	70.41	24	93	0.00	2.24	2.02
mp-867259	{'Rh': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	4.78	120.71	27	78	0.00	2.28	2.02
mp-16370	{'Th': 4.0, 'Ge': 2.0}	6	10.65	167.37	26	77	0.00	1.93	2.02
mp-1008558	{'Au': 1.0, 'N': 1.0}	2	11.33	30.92	22	139	0.00	2.20	2.02
mp-20608	{'Tb': 4.0, 'In': 2.0}	6	8.34	172.31	24	54	0.00	1.94	2.02
mp-976405	{'Na': 1.0, 'Er': 3.0}	4	7.09	122.89	18	33	0.00	1.87	2.01
mp-19966	{'Gd': 1.0, 'Tl': 1.0}	2	10.46	57.43	18	63	0.00	2.14	2.01
mp-974322	{'Ho': 6.0, 'Mg': 2.0}	8	7.39	233.19	25	38	0.00	1.86	2.01
mp-22899	{'Li': 1.0, 'I': 1.0}	2	4.06	54.70	13	21	4.24	2.08	2.01
mp-979951	{'Yb': 3.0, 'U': 1.0}	4	8.83	142.36	20	10	0.00	1.91	2.01
mp-9561	{'V': 1.0, 'S': 2.0}	3	3.31	57.75	16	20	0.00	2.10	2.00
mp-850131	{'Ni': 2.0, 'S': 4.0}	6	4.32	94.35	23	27	0.00	1.98	2.00
mp-12741	{'Mg': 4.0, 'Pd': 8.0}	12	8.30	189.88	42	115	0.00	2.13	2.00
mp-1018142	{'Nb': 1.0, 'N': 1.0}	2	6.45	27.52	17	227	0.00	2.07	2.00
mp-10844	{'Te': 8.0, 'Ir': 4.0}	12	10.61	280.06	48	121	0.00	2.34	2.00
mp-11375	{'Eu': 1.0, 'Hg': 1.0}	2	9.84	59.52	16	30	0.00	1.99	2.00
mp-864603	{'Yb': 4.0, 'H': 8.0}	12	8.47	137.22	35	50	2.89	1.72	1.99
mp-981233	{'U': 1.0, 'Cr': 3.0}	4	11.52	56.79	27	163	0.00	2.02	1.99
mp-13453	{'Be': 2.0, 'Pd': 6.0}	8	10.12	107.71	37	162	0.00	2.08	1.99
mvc-11196	{'Ag': 1.0, 'N': 1.0}	2	8.52	23.75	23	121	0.00	2.33	1.98
mp-637255	{'Ti': 8.0, 'Sn': 12.0}	20	7.06	425.10	48	87	0.00	2.16	1.98
mp-999496	{'Na': 3.0, 'N': 1.0}	4	1.66	82.91	13	20	0.00	1.99	1.98
mp-1825	{'Cu': 4.0, 'Sb': 2.0}	6	8.36	98.82	35	92	0.00	2.34	1.98
mp-23714	{'Sr': 4.0, 'H': 8.0}	12	3.32	179.45	24	37	3.24	1.72	1.97
mp-2740	{'Er': 1.0, 'Co': 5.0}	6	9.36	81.93	36	140	0.00	2.27	1.97
mp-20473	{'Mn': 4.0, 'Ge': 2.0}	6	7.82	77.52	32	140	0.00	2.17	1.97
mp-1385	{'Ce': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	7.16	125.68	26	53	0.00	2.05	1.97
mp-979	{'Zr': 8.0, 'Sb': 16.0}	24	7.42	599.03	50	81	0.00	2.14	1.97
mp-11469	{'Pr': 1.0, 'Hg': 1.0}	2	9.78	57.97	17	56	0.00	2.11	1.97
mp-2215	{'Th': 2.0, 'Hg': 4.0}	6	13.28	158.34	32	58	0.00	2.13	1.96
mp-679	{'Er': 16.0, 'O': 24.0}	40	8.65	587.20	67	148	3.98	1.99	1.96
mp-999539	{'Mn': 4.0, 'O': 4.0}	8	4.22	111.64	30	87	0.00	2.21	1.96
mp-1403	{'Sm': 8.0, 'S': 12.0}	20	5.72	460.70	37	77	0.74	1.92	1.96
mp-979026	{'Sm': 2.0, 'Tm': 6.0}	8	8.75	249.54	26	42	0.00	1.88	1.96
mp-1018179	{'Al': 1.0, 'Au': 2.0}	3	13.71	50.97	27	129	0.00	2.20	1.96
mp-12750	{'Sm': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	7.16	137.09	23	66	0.00	1.91	1.96
mp-558378	{'Pd': 6.0, 'S': 2.0}	8	9.04	129.13	38	114	0.00	2.24	1.95
mp-934	{'Li': 1.0, 'Tl': 1.0}	2	8.35	42.03	16	31	0.00	1.98	1.95
mp-27930	{'Li': 28.0, 'Si': 8.0}	36	1.30	537.06	28	33	0.00	1.69	1.95

mp-2659	{'Li': 1.0, 'N': 3.0}	4	1.79	45.42	15	35	3.66	2.00	1.95
mp-10051	{'Te': 1.0, 'As': 1.0}	2	6.43	52.27	14	71	0.00	2.01	1.94
mp-30490	{'Mg': 6.0, 'Cd': 2.0}	8	3.47	177.30	21	40	0.00	1.93	1.94
mp-984754	{'Pm': 2.0, 'Ho': 6.0}	8	8.18	259.71	25	45	0.00	1.89	1.94
mp-568430	{'Ba': 2.0, 'Rh': 4.0}	6	9.00	126.61	30	95	0.00	2.18	1.94
mp-1039055	{'Mg': 3.0, 'Cd': 1.0}	4	3.43	89.66	15	40	0.00	1.91	1.94
mp-976281	{'Li': 3.0, 'Pd': 1.0}	4	3.55	59.45	15	25	0.00	1.74	1.93
mp-31498	{'Ba': 2.0, 'Pt': 2.0}	4	8.71	126.81	19	50	0.00	1.92	1.93
mp-12635	{'Ti': 1.0, 'Au': 4.0}	5	15.87	87.46	39	144	0.00	2.36	1.93
mp-2597	{'In': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.49	62.04	15	84	0.00	2.18	1.93
mp-7541	{'Sn': 2.0, 'P': 6.0}	8	4.05	173.43	25	43	0.00	2.11	1.93
mp-15619	{'Ga': 8.0, 'As': 8.0}	16	5.48	350.87	41	56	0.00	2.23	1.93
mp-11470	{'Hg': 2.0, 'Pt': 1.0}	3	14.14	70.00	27	83	0.00	2.30	1.93
mp-571059	{'Y': 1.0, 'Cd': 3.0}	4	7.55	93.77	19	55	0.00	1.89	1.92
mp-1575	{'Ca': 2.0, 'C': 4.0}	6	2.17	98.15	15	53	2.19	1.78	1.92
mp-812	{'Ho': 16.0, 'O': 24.0}	40	8.40	597.29	65	145	3.96	1.99	1.92
mp-1039124	{'Mg': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	5.23	43.37	13	22	0.00	1.93	1.92
mp-570538	{'Na': 1.0, 'N': 3.0}	4	1.79	60.20	14	30	4.05	2.00	1.92
mp-1008376	{'Ce': 1.0, 'H': 3.0}	4	5.87	40.48	19	71	0.00	1.75	1.92
mp-760381	{'Cu': 1.0, 'S': 1.0}	2	4.52	35.10	17	77	0.00	2.36	1.92
mp-982664	{'K': 3.0, 'In': 1.0}	4	1.96	197.10	11	11	0.00	1.96	1.92
mp-1025409	{'Tm': 4.0, 'Pt': 4.0}	8	14.05	172.06	35	114	0.00	2.01	1.92
mp-621131	{'Ti': 3.0, 'Ag': 1.0}	4	6.06	68.86	25	123	0.00	2.32	1.92
mp-438	{'Nd': 8.0, 'S': 12.0}	20	5.34	478.15	35	74	0.76	1.91	1.92
mp-2206	{'Lu': 2.0, 'Co': 4.0}	6	11.00	88.40	34	127	0.00	2.16	1.91
mp-11374	{'Dy': 1.0, 'Tl': 1.0}	2	11.08	54.99	18	56	0.00	2.14	1.91
mp-12065	{'Ag': 3.0, 'Pt': 1.0}	4	12.46	69.12	34	120	0.00	2.42	1.91
mp-2707	{'U': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	9.89	161.74	27	57	0.00	2.06	1.91
mp-632	{'Tm': 2.0, 'Co': 4.0}	6	10.62	89.67	33	118	0.00	2.14	1.91
mp-2435	{'Ho': 1.0, 'Co': 5.0}	6	9.27	82.34	35	135	0.00	2.27	1.91
mp-603347	{'Ti': 2.0, 'Ni': 2.0}	4	6.63	53.38	20	103	0.00	1.87	1.91
mp-1666	{'Th': 8.0, 'S': 20.0}	28	6.93	598.58	47	97	2.12	1.96	1.91
mp-570670	{'Y': 4.0, 'Os': 8.0}	12	14.30	217.95	49	212	0.00	2.19	1.91
mp-1364	{'Y': 4.0, 'Ni': 4.0}	8	6.06	161.81	24	78	0.00	1.86	1.90
mp-568630	{'Lu': 4.0, 'Ru': 8.0}	12	11.99	208.97	49	186	0.00	2.27	1.90
mp-567314	{'Er': 4.0, 'Ni': 4.0}	8	9.73	154.22	26	90	0.00	1.72	1.90
mp-1018063	{'Er': 1.0, 'H': 3.0}	4	8.56	33.02	22	99	0.00	1.73	1.89
mp-597	{'Ti': 9.0, 'Ni': 9.0}	18	6.49	245.46	39	151	0.00	1.89	1.89
mvc-11780	{'Mo': 4.0, 'S': 8.0}	12	4.81	221.13	33	65	0.00	2.14	1.89
mp-20581	{'Ca': 3.0, 'In': 1.0}	4	2.97	131.50	13	25	0.00	1.91	1.89
mp-866199	{'Ac': 1.0, 'Ag': 1.0}	2	8.86	62.77	18	44	0.00	2.30	1.89
mp-568186	{'Y': 4.0, 'Ru': 8.0}	12	8.94	216.26	43	167	0.00	2.24	1.89
mp-318	{'Sr': 2.0, 'Ir': 4.0}	6	13.43	116.77	33	226	0.00	2.13	1.89
mp-1186	{'Zr': 1.0, 'S': 2.0}	3	3.31	78.00	13	18	1.04	1.95	1.89
mp-2345	{'Dy': 16.0, 'O': 24.0}	40	8.14	608.40	64	142	3.94	2.01	1.89
mp-8059	{'Si': 8.0, 'O': 16.0}	24	2.10	379.49	31	25	5.83	1.91	1.89
mp-321	{'Rh': 2.0, 'Pb': 4.0}	6	12.45	138.04	30	80	0.00	2.07	1.89
mp-1017552	{'Bi': 2.0, 'O': 3.0}	5	9.86	78.48	30	117	1.42	2.19	1.89
mp-21289	{'Ti': 1.0, 'Zn': 3.0}	4	6.70	60.52	24	96	0.00	2.18	1.89
mp-2398	{'Sc': 4.0, 'Sn': 8.0}	12	6.53	287.09	34	64	0.00	2.12	1.88
mp-985296	{'Ag': 3.0, 'Pd': 1.0}	4	10.32	69.22	32	99	0.00	2.44	1.88

mp-782	{'Te': 2.0, 'Pd': 1.0}	3	7.91	75.88	22	53	0.00	2.32	1.88
mp-865558	{'Ac': 1.0, 'Te': 3.0}	4	7.88	128.55	21	48	0.00	2.14	1.88
mp-8338	{'Ta': 1.0, 'F': 3.0}	4	5.46	72.34	21	102	0.00	2.15	1.88
mp-2093	{'Pr': 3.0, 'Al': 1.0}	4	6.23	119.95	17	42	0.00	1.92	1.88
mp-22040	{'Sn': 14.0, 'Ir': 6.0}	20	10.83	431.62	60	102	0.00	2.34	1.88
mp-978273	{'Mg': 3.0, 'Cd': 1.0}	4	3.48	88.44	15	40	0.00	1.93	1.87
mp-11568	{'Sm': 1.0, 'Tl': 1.0}	2	10.16	57.95	17	51	0.00	2.14	1.87
mp-1793	{'Zr': 12.0, 'Te': 4.0}	16	7.21	369.92	39	106	0.00	2.09	1.87
mp-975652	{'Pr': 2.0, 'Te': 4.0}	6	6.95	189.32	23	52	0.00	2.07	1.87
mp-975639	{'Pr': 3.0, 'Er': 1.0}	4	7.05	138.93	19	35	0.00	2.07	1.87
mp-865934	{'Yb': 2.0, 'F': 4.0}	6	7.54	92.94	29	81	6.73	2.15	1.87
mp-972285	{'Sr': 3.0, 'Li': 1.0}	4	2.34	191.14	10	11	0.00	1.74	1.87
mp-1025431	{'Sm': 4.0, 'Pt': 4.0}	8	12.18	188.31	31	93	0.00	1.96	1.87
mp-230	{'Sb': 8.0, 'O': 16.0}	24	6.28	325.19	55	96	1.90	2.22	1.87
mp-14587	{'Zn': 4.0, 'P': 16.0}	20	3.37	372.59	35	63	1.01	2.08	1.86
mp-571405	{'Nd': 1.0, 'Tl': 1.0}	2	9.67	59.86	16	52	0.00	2.09	1.86
mp-505531	{'Fe': 2.0, 'S': 2.0}	4	4.14	70.52	19	30	0.00	2.11	1.85
mp-20539	{'Sc': 1.0, 'In': 3.0}	4	6.93	93.31	21	56	0.00	2.12	1.85
mp-406	{'Cd': 1.0, 'Te': 1.0}	2	5.47	72.83	14	35	1.23	2.24	1.85
mp-672	{'Cd': 2.0, 'S': 2.0}	4	4.58	104.86	18	53	1.12	2.14	1.85
mp-30494	{'Sc': 2.0, 'Cd': 6.0}	8	7.29	174.18	27	61	0.00	1.98	1.85
mp-20866	{'Ge': 4.0, 'Rh': 4.0}	8	9.76	119.52	39	78	0.00	2.26	1.85
mp-2189	{'Cr': 2.0, 'Se': 2.0}	4	5.74	75.79	21	58	0.00	2.15	1.85
mp-30502	{'Tm': 2.0, 'Cd': 6.0}	8	8.93	188.21	28	55	0.00	1.96	1.84
mp-568320	{'Y': 8.0, 'Sb': 6.0}	14	6.09	393.09	31	65	0.00	1.99	1.84
mp-569	{'Nd': 1.0, 'Co': 5.0}	6	8.48	85.93	32	118	0.00	2.23	1.84
mp-11302	{'Ho': 2.0, 'Cd': 6.0}	8	8.74	190.72	27	53	0.00	1.92	1.84
mp-863720	{'Hg': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	12.90	66.89	31	135	0.00	2.30	1.84
mp-15179	{'Pr': 8.0, 'S': 12.0}	20	5.14	488.92	35	73	0.78	1.98	1.84
mp-973983	{'Ni': 2.0, 'Pd': 6.0}	8	11.29	111.22	40	173	0.00	2.23	1.84
mp-555434	{'As': 8.0, 'O': 20.0}	28	4.22	361.98	47	93	1.34	2.08	1.84
mp-1329	{'La': 2.0, 'Te': 4.0}	6	6.78	193.18	22	49	0.00	2.04	1.84
mp-7303	{'Er': 2.0, 'Cd': 6.0}	8	8.84	189.48	27	55	0.00	1.92	1.84
mp-29803	{'Si': 2.0, 'H': 2.0}	4	1.28	75.66	10	17	2.14	1.78	1.84
mp-1834	{'Nd': 1.0, 'Al': 4.0}	5	4.03	103.78	17	72	0.00	1.91	1.83
mp-978293	{'Mg': 3.0, 'Pb': 1.0}	4	4.78	97.34	16	69	0.00	1.93	1.83
mp-1722	{'Zn': 13.0, 'Fe': 1.0}	14	7.32	205.58	42	86	0.00	2.15	1.83
mp-2551	{'Dy': 1.0, 'Co': 5.0}	6	9.17	82.76	34	136	0.00	2.28	1.83
mp-948	{'Zn': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.67	48.04	15	55	0.00	2.13	1.82
mp-2180	{'Hf': 8.0, 'Sb': 16.0}	24	9.51	589.63	49	84	0.00	2.06	1.82
mp-2716	{'Ti': 9.0, 'Ni': 9.0}	18	6.53	243.99	38	152	0.00	1.88	1.82
mp-704645	{'Cu': 2.0, 'O': 2.0}	4	5.94	44.49	25	146	0.00	2.24	1.82
mp-12467	{'Ca': 10.0, 'Sb': 6.0}	16	3.76	499.88	26	36	0.00	1.91	1.82
mp-2012	{'Li': 1.0, 'Hg': 1.0}	2	9.21	37.42	16	31	0.00	1.97	1.82
mp-22901	{'K': 1.0, 'I': 1.0}	2	3.36	82.11	12	50	3.91	2.32	1.82
mp-30800	{'Nd': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	7.03	129.97	23	61	0.00	1.97	1.81
mp-1068	{'Cu': 4.0, 'S': 8.0}	12	4.35	195.06	35	77	0.00	2.28	1.81
mp-2156	{'Ti': 1.0, 'S': 2.0}	3	2.87	64.91	14	18	0.00	2.12	1.81
mp-976414	{'Li': 3.0, 'Zn': 1.0}	4	2.15	66.50	12	18	0.00	1.76	1.81
mp-1294	{'Y': 2.0, 'Co': 4.0}	6	7.58	90.57	29	115	0.00	2.18	1.80
mp-979923	{'Sm': 2.0, 'Mn': 6.0}	8	7.20	145.42	29	69	0.00	2.06	1.80

mp-402	{'Cd': 4.0, 'P': 8.0}	12	4.02	288.12	28	54	1.53	2.12	1.80
mp-973374	{'Li': 2.0, 'Mg': 4.0}	6	1.43	129.46	13	28	0.00	1.92	1.80
mp-22464	{'Na': 1.0, 'O': 3.0}	4	2.12	55.67	15	19	0.62	2.04	1.80
mp-581786	{'Cu': 6.0, 'Sn': 2.0}	8	8.90	115.48	39	108	0.00	2.33	1.80
mp-21092	{'In': 2.0, 'Ni': 4.0}	6	9.14	84.41	22	136	0.00	1.66	1.80
mp-1038829	{'Mg': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	5.15	44.05	12	39	0.00	1.91	1.79
mp-22916	{'Na': 1.0, 'Br': 1.0}	2	3.12	54.75	12	27	4.09	2.22	1.79
mp-561258	{'Zn': 10.0, 'S': 10.0}	20	4.00	405.05	34	70	2.00	2.02	1.79
mp-21481	{'Pr': 3.0, 'Pb': 1.0}	4	8.14	128.44	20	38	0.00	2.10	1.79
mp-1692	{'Cu': 2.0, 'O': 2.0}	4	5.98	44.17	25	143	0.00	2.26	1.79
mp-862565	{'Sc': 2.0, 'Br': 4.0}	6	3.95	171.94	19	33	0.00	2.07	1.79
mp-872	{'Ba': 2.0, 'Sn': 2.0}	4	5.24	162.19	16	28	0.00	2.06	1.79
mp-1056	{'Tb': 16.0, 'O': 24.0}	40	7.84	620.13	61	140	3.91	2.02	1.79
mp-2481	{'Mg': 8.0, 'Cu': 4.0}	12	3.43	217.21	27	58	0.00	2.06	1.79
mp-10264	{'Ni': 2.0, 'Te': 2.0}	4	7.17	86.28	17	36	0.00	1.79	1.78
mp-971669	{'Fe': 4.0, 'Sb': 12.0}	16	7.24	386.60	44	82	0.00	2.32	1.78
mp-864675	{'Yb': 6.0, 'N': 4.0}	10	10.30	176.40	34	79	0.49	1.98	1.78
mp-864952	{'Mg': 6.0, 'Ag': 2.0}	8	3.71	161.95	23	48	0.00	2.09	1.78
mp-1019266	{'Sm': 2.0, 'Te': 4.0}	6	7.39	182.28	22	54	0.00	2.01	1.78
mp-12177	{'Te': 4.0, 'O': 10.0}	14	5.29	210.36	39	46	1.70	2.21	1.77
mp-30884	{'Y': 4.0, 'Zn': 12.0}	16	6.35	298.43	38	71	0.00	2.09	1.77
mp-995122	{'Nb': 1.0, 'S': 2.0}	3	4.18	62.32	16	19	0.00	2.13	1.77
mp-560203	{'Si': 12.0, 'O': 24.0}	36	2.62	456.27	42	55	5.48	2.00	1.77
mp-971833	{'Tm': 3.0, 'V': 1.0}	4	8.84	104.72	19	55	0.00	1.94	1.77
mp-971958	{'Tm': 3.0, 'P': 1.0}	4	9.80	91.10	20	59	0.00	1.92	1.76
mp-2588	{'Y': 3.0, 'Co': 9.0}	12	7.54	175.52	40	152	0.00	2.21	1.76
mp-10636	{'Sr': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	5.64	195.15	21	25	0.00	2.09	1.76
mp-1001833	{'In': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	6.67	80.66	14	31	0.00	2.22	1.76
mp-754629	{'W': 3.0, 'N': 6.0}	9	5.76	183.19	26	103	1.00	2.01	1.75
mp-680677	{'Sn': 12.0, 'Ru': 8.0}	20	9.45	392.25	58	127	0.00	2.41	1.75
mp-1006878	{'Ba': 1.0, 'O': 2.0}	3	5.00	56.23	17	28	2.34	2.13	1.75
mp-979459	{'Sm': 5.0, 'Mg': 1.0}	6	6.68	192.79	19	38	0.00	1.87	1.74
mp-1019324	{'Tb': 2.0, 'Te': 4.0}	6	7.75	177.49	22	59	0.00	2.00	1.74
mp-1123	{'Hg': 1.0, 'S': 1.0}	2	7.13	54.20	15	50	0.00	2.18	1.74
mp-1926	{'Ho': 2.0, 'Fe': 4.0}	6	9.69	94.79	28	86	0.00	2.05	1.74
mp-2369	{'Sn': 4.0, 'Pd': 4.0}	8	9.34	160.03	36	101	0.00	2.33	1.74
mp-12070	{'Cu': 2.0, 'As': 2.0}	4	7.12	64.62	26	102	0.00	2.38	1.73
mp-20050	{'In': 2.0, 'P': 6.0}	8	4.16	165.98	23	51	0.00	2.07	1.73
mp-569265	{'Mg': 6.0, 'Pt': 2.0}	8	5.76	154.65	24	71	0.00	1.96	1.73
mp-571335	{'Th': 2.0, 'Bi': 4.0}	6	11.06	195.13	27	66	0.00	2.17	1.73
mp-13364	{'Ca': 4.0, 'Zn': 8.0}	12	4.65	244.04	28	48	0.00	2.03	1.73
mp-1038961	{'Ca': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	1.63	65.51	7	16	0.00	1.84	1.73
mp-30767	{'Li': 14.0, 'Sn': 4.0}	18	2.97	319.32	25	28	0.00	1.75	1.72
mp-569785	{'Tl': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	12.69	68.50	28	132	0.00	2.23	1.72
mp-23209	{'Sr': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	3.01	87.50	13	34	5.23	2.16	1.72
mp-2726	{'Sr': 1.0, 'Cu': 5.0}	6	6.97	96.53	30	83	0.00	2.33	1.72
mp-865357	{'Zn': 3.0, 'Pd': 1.0}	4	8.58	58.56	24	112	0.00	2.14	1.72
mp-862329	{'Sc': 2.0, 'I': 4.0}	6	4.61	215.26	20	38	0.00	2.19	1.72
mp-568306	{'Mg': 5.0, 'Si': 6.0}	11	2.40	200.54	20	63	0.00	1.90	1.72
mp-971	{'K': 2.0, 'O': 1.0}	3	2.29	68.27	12	27	1.72	2.09	1.72
mp-20469	{'Yb': 1.0, 'In': 3.0}	4	8.34	102.98	21	34	0.00	2.12	1.71

mp-973465	{'Ho': 6.0, 'In': 2.0}	8	8.96	225.88	25	53	0.00	1.93	1.71
mp-733	{'Ge': 3.0, 'O': 6.0}	9	4.04	129.14	28	38	3.26	2.17	1.71
mp-441	{'Rb': 2.0, 'Te': 1.0}	3	3.11	159.50	11	30	1.89	2.10	1.71
mp-1604	{'Pt': 6.0, 'O': 8.0}	14	11.86	181.87	58	213	0.00	2.43	1.71
mp-27668	{'Mg': 4.0, 'Ga': 10.0}	14	4.87	270.76	33	45	0.00	2.13	1.70
mp-7475	{'La': 8.0, 'S': 12.0}	20	4.94	503.37	32	69	1.04	1.95	1.70
mp-22095	{'Ga': 2.0, 'Pt': 1.0}	3	10.28	54.05	22	114	0.00	2.20	1.70
mp-979940	{'Yb': 3.0, 'Zr': 1.0}	4	7.87	128.79	17	30	0.00	1.92	1.70
mp-1018692	{'Er': 2.0, 'Te': 4.0}	6	8.10	173.24	22	61	0.00	2.00	1.70
mp-12087	{'Cu': 2.0, 'S': 1.0}	3	6.17	42.81	22	97	0.03	2.37	1.69
mp-571195	{'Zn': 3.0, 'Te': 3.0}	6	5.42	177.26	21	41	1.07	2.13	1.69
mvc-14149	{'Co': 4.0, 'O': 8.0}	12	4.66	129.64	35	83	0.59	2.18	1.69
mp-754672	{'Ti': 4.0, 'O': 8.0}	12	2.96	179.46	24	68	2.99	1.96	1.69
mp-975651	{'Pr': 2.0, 'Tm': 6.0}	8	8.41	255.75	24	41	0.00	1.94	1.69
mp-866066	{'B': 4.0, 'S': 6.0}	10	1.95	200.15	16	20	1.55	1.75	1.69
mp-569073	{'Li': 3.0, 'Sn': 3.0}	6	4.99	125.50	19	35	0.00	1.91	1.68
mp-9371	{'Er': 4.0, 'F': 12.0}	16	7.48	199.19	44	72	7.87	2.14	1.68
mp-2349	{'Y': 2.0, 'Cd': 6.0}	8	7.35	192.65	24	56	0.00	1.93	1.68
mp-15621	{'Al': 8.0, 'Sb': 8.0}	16	4.48	441.17	30	49	0.02	2.08	1.68
mp-2137	{'Mg': 12.0, 'Ni': 6.0}	18	3.48	307.09	29	65	0.00	1.93	1.68
mp-218	{'Sm': 16.0, 'O': 24.0}	40	6.96	665.42	55	130	3.88	2.01	1.68
mp-1009005	{'Ir': 1.0, 'N': 1.0}	2	16.34	20.95	26	358	0.00	2.33	1.68
mp-20664	{'Mn': 4.0, 'Sb': 2.0}	6	7.76	99.16	26	86	0.00	2.10	1.67
mp-22924	{'Na': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	6.63	58.12	13	29	0.00	2.05	1.67
mp-980063	{'Yb': 1.0, 'Dy': 3.0}	4	8.48	129.30	18	33	0.00	1.98	1.67
mp-27821	{'Ag': 3.0, 'P': 11.0}	14	3.76	293.67	32	53	1.10	2.27	1.67
mp-13447	{'Zn': 13.0, 'Rh': 1.0}	14	7.51	210.63	40	88	0.00	2.16	1.67
mp-975794	{'Li': 3.0, 'Be': 1.0}	4	0.85	58.42	8	20	0.00	1.67	1.67
mp-9460	{'Zn': 24.0, 'N': 16.0}	40	6.22	479.21	57	130	0.43	2.02	1.67
mp-13138	{'Cu': 6.0, 'Sn': 2.0}	8	8.88	115.63	37	106	0.00	2.33	1.67
mp-2808	{'Zr': 1.0, 'Rh': 1.0}	2	8.91	36.19	18	165	0.00	2.27	1.66
mp-10497	{'Sr': 2.0, 'C': 4.0}	6	3.15	117.70	15	46	2.42	1.79	1.66
mp-977182	{'Na': 1.0, 'Nb': 3.0}	4	6.61	75.83	20	113	0.00	2.12	1.66
mp-865355	{'Zn': 3.0, 'Pt': 1.0}	4	11.16	58.23	25	128	0.00	2.11	1.66
mp-2310	{'Cd': 4.0, 'O': 8.0}	12	6.08	157.88	36	103	1.28	2.18	1.66
mp-1022	{'K': 2.0, 'S': 1.0}	3	1.76	103.98	10	19	2.32	2.12	1.65
mp-9948	{'V': 5.0, 'Te': 4.0}	9	6.80	186.90	30	50	0.00	2.18	1.65
mp-754628	{'W': 4.0, 'N': 8.0}	12	4.89	287.77	26	121	0.96	2.02	1.65
mp-19761	{'La': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	6.45	146.39	20	65	0.00	1.95	1.64
mp-29647	{'Sm': 4.0, 'Sb': 8.0}	12	7.50	348.65	30	59	0.00	2.07	1.64
mp-2512	{'As': 2.0, 'Pd': 10.0}	12	10.78	187.04	44	151	0.00	2.27	1.64
mp-1039447	{'Ca': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	2.97	58.93	9	23	0.00	1.93	1.64
mp-864641	{'Ho': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	4.80	163.33	20	50	0.00	2.13	1.64
mp-999439	{'Nb': 3.0, 'Cr': 1.0}	4	8.23	66.70	22	123	0.00	2.13	1.63
mp-1025421	{'Sm': 2.0, 'O': 6.0}	8	4.79	137.55	24	66	0.18	2.07	1.63
mp-30635	{'Fe': 3.0, 'Pd': 1.0}	4	8.76	51.94	23	163	0.00	2.09	1.63
mp-974325	{'Nd': 2.0, 'Dy': 6.0}	8	7.96	263.56	23	36	0.00	1.95	1.63
mp-30483	{'Ca': 2.0, 'Zn': 2.0}	4	3.27	107.11	13	32	0.00	1.95	1.63
mp-12599	{'Pr': 1.0, 'Tl': 1.0}	2	9.36	61.23	16	51	0.00	2.25	1.63
mp-1045	{'Nd': 16.0, 'O': 24.0}	40	6.40	698.91	51	124	3.71	1.99	1.63
mp-423	{'Ge': 3.0, 'Pd': 6.0}	9	10.19	139.59	38	152	0.00	2.28	1.62

mp-2639	{'Na': 3.0, 'N': 1.0}	4	1.29	106.90	10	5	0.03	1.95	1.62
mp-975658	{'Pr': 2.0, 'Ho': 6.0}	8	8.06	261.85	23	40	0.00	1.95	1.62
mp-2426	{'Li': 1.0, 'Ag': 1.0}	2	5.86	32.52	15	61	0.00	2.19	1.61
mp-1013526	{'V': 1.0, 'S': 2.0}	3	3.36	56.80	14	17	0.00	2.10	1.61
mp-1010953	{'Mg': 1.0, 'Ni': 1.0}	2	4.87	28.27	12	85	0.00	1.91	1.61
mp-21177	{'Tm': 1.0, 'In': 3.0}	4	8.67	98.38	20	56	0.00	2.10	1.61
mp-2396	{'Ho': 2.0, 'Co': 4.0}	6	10.22	91.87	29	120	0.00	2.15	1.61
mp-23299	{'Rb': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	3.15	63.83	12	26	4.80	2.38	1.61
mp-979039	{'Th': 3.0, 'Au': 1.0}	4	12.93	114.66	20	87	0.00	1.96	1.60
mp-1687	{'Ba': 2.0, 'Pd': 4.0}	6	8.65	134.45	25	71	0.00	2.13	1.60
mp-1811	{'Hg': 1.0, 'Te': 1.0}	2	9.35	58.27	16	65	0.00	2.26	1.60
mp-978088	{'Pr': 2.0, 'Lu': 6.0}	8	8.85	249.92	24	41	0.00	1.97	1.60
mp-619461	{'W': 8.0, 'O': 24.0}	32	6.70	459.50	54	61	1.37	2.12	1.59
mp-972912	{'La': 3.0, 'Er': 1.0}	4	6.86	141.33	16	26	0.00	1.99	1.59
mp-936	{'Hg': 4.0, 'Pt': 1.0}	5	12.72	130.24	28	59	0.00	2.28	1.59
mp-504886	{'Gd': 16.0, 'O': 24.0}	40	7.51	640.82	55	131	2.94	2.01	1.59
mp-10009	{'Ga': 4.0, 'Te': 4.0}	8	4.80	272.78	22	39	0.90	2.18	1.59
mp-9907	{'Sr': 2.0, 'As': 6.0}	8	5.01	207.05	22	33	0.00	2.06	1.59
mp-865907	{'Li': 1.0, 'Zn': 3.0}	4	5.84	57.80	19	58	0.00	2.05	1.59
mp-1869	{'Ga': 4.0, 'Pd': 8.0}	12	10.35	181.38	42	149	0.00	2.24	1.59
mp-539	{'Ga': 4.0, 'S': 6.0}	10	3.44	227.73	23	31	2.03	2.12	1.58
mp-582360	{'Ta': 10.0, 'Pd': 30.0}	40	13.20	629.04	76	200	0.00	2.22	1.58
mp-8033	{'Pu': 2.0, 'F': 6.0}	8	9.34	107.08	32	116	0.00	2.12	1.58
mp-1291	{'Er': 1.0, 'In': 3.0}	4	8.54	99.54	20	54	0.00	2.12	1.58
mp-27932	{'Li': 18.0, 'Ge': 8.0}	26	2.86	409.62	27	34	0.00	1.69	1.58
mp-315	{'Pb': 1.0, 'F': 2.0}	3	7.55	53.93	22	70	4.44	2.42	1.58
mp-1008488	{'Bi': 2.0, 'Pd': 2.0}	4	11.25	93.09	23	86	0.00	2.18	1.58
mp-983607	{'V': 6.0, 'Cd': 2.0}	8	7.09	124.25	30	134	0.00	2.22	1.58
mp-867226	{'Li': 3.0, 'In': 1.0}	4	3.06	73.55	12	25	0.00	1.76	1.58
mp-12723	{'Ca': 2.0, 'Au': 2.0}	4	7.57	103.99	18	47	0.00	2.04	1.57
mp-976256	{'Li': 3.0, 'Mg': 1.0}	4	0.93	80.37	8	20	0.00	1.79	1.57
mp-7868	{'Pt': 2.0, 'O': 4.0}	6	9.22	81.81	31	46	1.54	2.25	1.57
mp-976768	{'Na': 1.0, 'Mg': 3.0}	4	1.57	101.32	10	15	0.00	1.92	1.57
mp-2739	{'Te': 4.0, 'O': 8.0}	12	5.63	188.28	35	5	2.89	2.16	1.57
mp-639874	{'Ta': 20.0, 'Al': 10.0}	30	12.12	533.01	54	162	0.00	1.99	1.57
mp-973736	{'Ge': 1.0, 'As': 3.0}	4	6.10	80.90	19	71	0.00	2.16	1.57
mp-976751	{'Nd': 6.0, 'Zr': 2.0}	8	6.82	254.98	20	39	0.00	1.85	1.57
mvc-13555	{'Cr': 1.0, 'S': 2.0}	3	3.08	62.55	13	15	0.00	2.10	1.56
mp-1038814	{'Mg': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	5.27	43.08	11	35	0.00	1.90	1.56
mp-7709	{'Zn': 4.0, 'F': 8.0}	12	4.75	144.53	31	96	3.56	2.11	1.56
mp-977218	{'Li': 4.0, 'Mg': 2.0}	6	1.02	123.93	10	21	0.00	1.82	1.56
mp-1361	{'Ir': 8.0, 'Se': 16.0}	24	9.54	487.41	54	106	0.07	2.30	1.56
mp-975028	{'Rb': 3.0, 'Cd': 1.0}	4	2.45	250.15	10	14	0.00	2.00	1.56
mp-1008809	{'Pt': 1.0, 'N': 2.0}	3	10.56	35.07	24	119	0.11	2.26	1.56
mp-567538	{'Yb': 2.0, 'Cu': 4.0}	6	9.55	104.36	28	60	0.00	2.19	1.56
mp-976139	{'Li': 3.0, 'Mg': 1.0}	4	0.93	80.67	8	19	0.00	1.80	1.55
mp-1704	{'Tb': 4.0, 'Tl': 2.0}	6	10.01	173.21	22	50	0.00	1.98	1.55
mp-2547	{'Yb': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	11.27	41.17	15	53	0.00	1.98	1.55
mp-862601	{'Rh': 2.0, 'I': 4.0}	6	6.89	171.90	26	60	0.00	2.42	1.55
mp-568564	{'V': 6.0, 'Cd': 2.0}	8	7.23	121.88	30	134	0.00	2.22	1.55
mp-7819	{'Pd': 8.0, 'S': 2.0}	10	9.93	153.04	37	147	0.00	2.23	1.55

mp-30625	{'Dy': 4.0, 'Tl': 2.0}	6	10.29	170.91	23	52	0.00	2.03	1.55
mp-985805	{'Al': 2.0, 'Ag': 4.0}	6	7.81	103.15	30	94	0.00	2.41	1.55
mp-1802	{'Nb': 1.0, 'S': 2.0}	3	3.95	66.04	14	23	0.00	2.13	1.54
mp-1437	{'Li': 2.0, 'Cd': 2.0}	4	5.16	76.78	15	35	0.00	1.88	1.54
mp-1399	{'Al': 4.0, 'Au': 4.0}	8	10.54	141.10	31	104	0.00	2.13	1.54
mp-30500	{'Ti': 2.0, 'Cd': 2.0}	4	6.90	77.17	19	81	0.00	2.10	1.54
mp-976425	{'Nd': 4.0, 'Mg': 2.0}	6	5.47	189.84	16	35	0.00	1.84	1.54
mp-27253	{'Au': 4.0, 'O': 6.0}	10	10.41	141.03	38	81	0.89	2.21	1.53
mp-20622	{'Si': 4.0, 'Pd': 12.0}	16	9.66	238.88	44	161	0.00	2.19	1.53
mp-2525	{'Pr': 1.0, 'Ag': 1.0}	2	7.55	54.72	15	51	0.00	2.28	1.53
mp-984765	{'Ba': 6.0, 'Te': 2.0}	8	5.21	344.08	18	15	0.00	1.92	1.53
mp-22687	{'Ba': 1.0, 'In': 4.0}	5	6.31	157.11	20	33	0.00	2.22	1.53
mp-570377	{'Sn': 3.0, 'As': 4.0}	7	5.41	201.35	21	39	0.75	2.12	1.53
mp-979933	{'Tm': 6.0, 'Si': 2.0}	8	9.35	189.93	23	59	0.00	1.84	1.52
mp-861939	{'Ac': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	8.79	151.10	19	38	0.00	2.20	1.52
mp-2000	{'Cu': 2.0, 'Se': 4.0}	6	6.16	119.49	24	64	0.00	2.25	1.52
mp-28919	{'Hf': 3.0, 'Te': 2.0}	5	9.96	131.87	20	27	0.00	1.93	1.52
mp-966	{'Nb': 1.0, 'S': 2.0}	3	4.08	63.97	14	24	0.00	2.12	1.52
mp-183	{'Ce': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	7.35	57.09	12	10	0.00	1.93	1.51
mp-10228	{'Nb': 1.0, 'Se': 2.0}	3	5.87	70.98	16	25	0.00	2.18	1.51
mp-983152	{'Li': 6.0, 'Re': 2.0}	8	5.99	114.71	21	44	0.00	1.76	1.51
mp-1018164	{'Pt': 1.0, 'C': 1.0}	2	13.00	26.45	18	209	0.00	2.07	1.51
mp-570835	{'Ni': 1.0, 'Hg': 4.0}	5	12.09	118.23	27	51	0.00	2.27	1.51
mp-866056	{'Ac': 2.0, 'N': 2.0}	4	7.92	101.09	18	77	0.06	2.07	1.50
mp-7818	{'Pd': 8.0, 'Se': 2.0}	10	10.30	162.77	37	139	0.00	2.26	1.50
mp-572283	{'Si': 16.0, 'O': 32.0}	48	2.63	606.35	42	90	5.40	1.98	1.50
mp-1039	{'Mg': 2.0, 'Te': 2.0}	4	3.65	138.26	12	35	2.36	1.94	1.50
mp-844	{'Ca': 24.0, 'N': 16.0}	40	2.61	755.59	34	68	1.11	1.93	1.50
mp-979234	{'Sm': 6.0, 'Y': 2.0}	8	6.60	271.88	19	38	0.00	1.86	1.50
mp-20225	{'Ce': 1.0, 'Pb': 3.0}	4	10.82	116.91	18	50	0.00	1.95	1.50
mp-1982	{'Al': 42.0, 'Pt': 16.0}	58	7.71	916.42	62	133	0.00	1.98	1.50
mp-7711	{'Ag': 2.0, 'O': 1.0}	3	8.61	44.67	23	84	0.00	2.41	1.50
mp-22033	{'Ti': 20.0, 'Sb': 12.0}	32	6.53	614.64	46	111	0.00	2.08	1.50
mp-30655	{'Ga': 32.0, 'Ni': 24.0}	56	7.99	756.41	62	132	0.00	1.94	1.50
mp-1412	{'Ti': 6.0, 'Sb': 2.0}	8	6.20	142.03	25	120	0.00	2.11	1.50
mp-8732	{'Ta': 4.0, 'Se': 2.0}	6	12.22	119.81	26	40	0.00	2.03	1.49
mp-22375	{'In': 4.0, 'S': 6.0}	10	4.71	229.61	24	85	0.52	2.12	1.49
mp-1690	{'Ta': 1.0, 'S': 2.0}	3	5.92	68.72	15	17	0.00	2.06	1.49
mp-239	{'Ba': 2.0, 'S': 6.0}	8	3.76	206.51	19	33	1.62	2.05	1.49
mp-13119	{'Cd': 2.0, 'O': 2.0}	4	6.23	68.47	19	93	0.00	2.15	1.49
mp-1009218	{'Mo': 1.0, 'C': 1.0}	2	6.91	25.93	13	246	0.00	1.91	1.49
mp-12062	{'Ag': 1.0, 'B': 2.0}	3	6.67	32.24	17	134	0.00	1.99	1.49
mp-950	{'Na': 2.0, 'Zn': 26.0}	28	6.24	464.68	45	64	0.00	2.10	1.49
mp-2462	{'Pr': 1.0, 'Cu': 5.0}	6	8.13	93.69	28	100	0.00	2.30	1.49
mp-30769	{'Li': 13.0, 'Sn': 5.0}	18	3.48	325.90	24	30	0.00	1.77	1.48
mp-981747	{'Sm': 5.0, 'Mg': 1.0}	6	6.71	192.09	17	36	0.00	1.87	1.48
mp-19816	{'Sm': 4.0, 'In': 2.0}	6	7.49	184.23	19	45	0.00	1.97	1.48
mp-1039434	{'Mg': 5.0, 'Cd': 1.0}	6	2.84	136.65	14	40	0.00	1.91	1.48
mp-1391	{'Ag': 2.0, 'F': 1.0}	3	8.31	46.91	23	74	0.00	2.46	1.47
mp-22598	{'In': 16.0, 'O': 24.0}	40	6.75	546.29	58	145	0.93	2.17	1.47
mp-979339	{'Sm': 6.0, 'Cd': 2.0}	8	7.73	242.02	20	41	0.00	1.84	1.47

mp-982385	{'Np': 12.0, 'S': 20.0}	32	8.69	665.80	45	74	0.00	1.94	1.47
mp-227	{'Sm': 1.0, 'Cu': 5.0}	6	8.50	91.46	28	71	0.00	2.27	1.47
mp-979614	{'Sm': 6.0, 'Er': 2.0}	8	7.61	269.93	20	38	0.00	1.88	1.47
mp-7581	{'Mo': 1.0, 'Se': 2.0}	3	5.97	70.61	15	22	1.48	2.10	1.46
mp-979899	{'Sm': 6.0, 'Ho': 2.0}	8	7.68	266.50	20	37	0.00	1.88	1.46
mp-976017	{'Li': 3.0, 'Co': 1.0}	4	2.35	56.32	11	26	0.00	1.76	1.46
mp-11718	{'Rb': 1.0, 'F': 1.0}	2	3.67	47.25	14	24	5.65	2.52	1.46
mp-30498	{'Tb': 2.0, 'Cd': 6.0}	8	8.57	192.34	23	54	0.00	1.94	1.45
mp-1598	{'Na': 6.0, 'P': 2.0}	8	1.75	189.48	14	26	0.40	1.97	1.45
mp-542106	{'Sb': 4.0, 'Pd': 8.0}	12	10.27	216.37	39	127	0.00	2.28	1.45
mp-984772	{'Ce': 3.0, 'Zn': 1.0}	4	8.22	98.08	17	44	0.00	1.98	1.45
mp-972808	{'Si': 4.0, 'O': 8.0}	12	2.14	186.19	19	36	5.57	1.92	1.45
mp-1008483	{'Cd': 2.0, 'N': 2.0}	4	7.38	56.91	17	100	0.00	1.87	1.45
mp-20487	{'La': 3.0, 'Ga': 1.0}	4	6.73	120.00	15	44	0.00	1.96	1.45
mp-328	{'Zr': 4.0, 'Ni': 2.0}	6	7.19	111.39	22	122	0.00	2.09	1.45
mp-1140	{'Nd': 1.0, 'Cu': 5.0}	6	8.26	92.83	27	106	0.00	2.26	1.44
mp-973300	{'Lu': 6.0, 'Ga': 2.0}	8	9.98	197.86	25	47	0.00	1.99	1.44
mp-973750	{'Lu': 2.0, 'Te': 4.0}	6	8.41	169.95	21	61	0.00	2.07	1.44
mp-1078	{'Ca': 4.0, 'Cd': 8.0}	12	5.66	310.93	23	40	0.00	1.90	1.44
mp-11550	{'Sc': 8.0, 'Pt': 4.0}	12	7.66	247.17	28	91	0.00	1.99	1.44
mp-777479	{'V': 4.0, 'O': 8.0}	12	2.83	194.54	22	42	1.48	2.03	1.43
mp-22895	{'Cu': 1.0, 'I': 1.0}	2	5.75	54.96	15	36	1.18	2.48	1.43
mp-1039119	{'Mg': 2.0, 'Al': 6.0}	8	2.44	143.13	16	67	0.00	1.95	1.43
mp-999295	{'Pr': 2.0, 'N': 2.0}	4	6.97	73.79	18	50	1.10	2.07	1.42
mp-1124	{'Mg': 4.0, 'Zn': 8.0}	12	5.11	201.68	27	64	0.00	2.07	1.42
mp-985281	{'Cs': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	9.51	56.77	14	35	0.00	2.15	1.41
mp-10149	{'In': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	6.77	58.07	13	50	0.00	2.23	1.41
mp-676	{'Ca': 2.0, 'N': 12.0}	14	2.14	192.28	22	45	3.42	2.03	1.41
mp-1747	{'K': 2.0, 'Te': 1.0}	3	2.45	139.47	9	27	2.14	2.07	1.41
mp-1879	{'Sm': 2.0, 'S': 2.0}	4	3.70	163.55	11	16	0.00	1.90	1.41
mp-972494	{'Sm': 2.0, 'Mg': 6.0}	8	3.59	206.60	16	30	0.00	1.87	1.41
mp-978274	{'Mg': 3.0, 'Cd': 3.0}	6	5.23	130.29	17	42	0.00	1.92	1.41
mp-2572	{'Sr': 4.0, 'Mg': 8.0}	12	2.40	376.49	16	26	0.00	1.86	1.41
mp-2815	{'Mo': 2.0, 'S': 4.0}	6	4.05	131.15	18	26	1.46	2.12	1.41
mp-551685	{'Pb': 4.0, 'O': 2.0}	6	8.72	163.88	20	58	0.00	1.99	1.41
mp-605663	{'Al': 4.0, 'Pd': 20.0}	24	10.20	364.02	51	162	0.00	2.20	1.40
mp-2738	{'Dy': 4.0, 'Ni': 4.0}	8	9.24	159.01	22	82	0.00	1.82	1.40
mp-1038767	{'Mg': 2.0, 'Cd': 2.0}	4	5.17	87.90	14	36	0.00	1.92	1.40
mp-561877	{'Ho': 4.0, 'F': 12.0}	16	7.58	194.40	40	65	7.98	2.16	1.40
mp-657	{'Yb': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	8.16	123.65	21	46	0.00	2.00	1.40
mp-2265	{'Tb': 2.0, 'Co': 4.0}	6	9.91	92.76	26	118	0.00	2.15	1.40
mp-1684	{'Zn': 1.0, 'Au': 1.0}	2	13.37	32.59	18	114	0.00	2.20	1.39
mp-1024071	{'Si': 3.0, 'Pt': 6.0}	9	15.53	134.17	35	186	0.00	2.09	1.39
mp-22154	{'In': 2.0, 'Au': 1.0}	3	9.45	74.96	18	52	0.00	2.24	1.39
mp-20456	{'Co': 6.0, 'Se': 8.0}	14	6.84	239.15	39	95	0.00	2.40	1.39
mp-12565	{'Mn': 1.0, 'Au': 4.0}	5	16.07	87.09	31	129	0.00	2.33	1.39
mp-11287	{'Ca': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	9.29	78.89	16	38	0.00	2.08	1.39
mp-22904	{'Ca': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	2.11	175.10	13	33	5.58	2.09	1.39
mp-1651	{'Th': 4.0, 'Al': 2.0}	6	9.65	169.01	19	70	0.00	1.90	1.38
mp-999540	{'Mn': 2.0, 'Se': 2.0}	4	4.25	104.71	13	51	0.00	1.98	1.38
mp-12910	{'Ge': 2.0, 'S': 2.0}	4	4.11	84.61	15	27	0.76	2.12	1.38

mp-7951	{'Th': 4.0, 'Se': 8.0}	12	8.35	310.10	27	78	0.65	2.00	1.38
mp-567891	{'Nd': 1.0, 'Ag': 2.0}	3	8.26	72.34	18	57	0.00	2.30	1.38
mp-973175	{'Sc': 1.0, 'Bi': 3.0}	4	9.62	116.00	18	56	0.00	2.10	1.38
mp-568069	{'Ti': 4.0, 'Bi': 2.0}	6	8.00	126.53	22	72	0.00	2.11	1.38
mp-580287	{'Zr': 3.0, 'Cu': 1.0}	4	6.99	80.15	23	99	0.00	2.51	1.37
mp-570460	{'La': 2.0, 'Co': 10.0}	12	8.25	174.47	36	131	0.00	2.26	1.37
mp-9918	{'Li': 8.0, 'Ge': 8.0}	16	3.76	280.96	22	40	0.00	1.76	1.37
mp-303	{'Ba': 2.0, 'Zn': 10.0}	12	6.23	247.52	27	48	0.00	2.06	1.37
mp-1024991	{'Er': 2.0, 'Cu': 4.0}	6	9.34	104.65	26	81	0.00	2.23	1.37
mp-972257	{'La': 2.0, 'Tb': 6.0}	8	7.56	270.38	19	32	0.00	1.87	1.37
mp-30650	{'Mg': 12.0, 'Ga': 6.0}	18	3.21	367.09	25	45	0.00	2.01	1.37
mp-593	{'Al': 16.0, 'Cu': 36.0}	52	6.85	658.84	70	129	0.00	2.31	1.36
mp-30363	{'Ba': 1.0, 'Au': 2.0}	3	9.97	88.49	17	45	0.00	2.20	1.36
mp-559676	{'Sn': 2.0, 'S': 2.0}	4	5.06	98.95	16	28	0.80	2.18	1.36
mp-2173	{'P': 8.0, 'O': 20.0}	28	2.68	352.18	32	38	4.86	2.01	1.35
mp-541289	{'Y': 12.0, 'S': 18.0}	30	3.78	723.07	30	66	1.60	1.93	1.35
mp-2076	{'Zr': 1.0, 'Se': 2.0}	3	4.94	83.83	12	18	0.34	1.99	1.35
mp-510417	{'W': 8.0, 'O': 24.0}	32	6.67	461.42	48	63	1.36	2.12	1.35
mp-979945	{'Yb': 3.0, 'V': 1.0}	4	7.60	124.50	15	21	0.00	1.96	1.35
mp-224	{'W': 2.0, 'S': 4.0}	6	6.58	125.22	20	27	1.57	2.06	1.35
mp-1948	{'La': 1.0, 'Ag': 1.0}	2	7.22	56.75	13	53	0.00	2.24	1.34
mp-977230	{'Li': 3.0, 'Tc': 1.0}	4	3.38	58.45	12	36	0.00	1.81	1.34
mp-8860	{'Na': 3.0, 'As': 1.0}	4	2.59	92.32	11	23	0.12	1.95	1.34
mp-32880	{'Cu': 1.0, 'Br': 1.0}	2	5.13	46.39	14	48	0.44	2.45	1.34
mp-976075	{'Li': 3.0, 'Ca': 1.0}	4	0.97	104.25	7	14	0.00	1.81	1.34
mp-2768	{'Ba': 4.0, 'As': 2.0}	6	4.93	235.49	14	24	0.00	1.89	1.34
mp-983604	{'Er': 3.0, 'As': 1.0}	4	9.84	97.34	17	57	0.00	1.98	1.33
mp-1731	{'La': 1.0, 'Co': 5.0}	6	8.32	86.52	26	133	0.00	2.26	1.33
mp-1444	{'Ca': 2.0, 'Cd': 4.0}	6	5.49	160.39	16	34	0.00	1.92	1.33
mp-569018	{'Mg': 3.0, 'Bi': 2.0}	5	5.67	143.85	15	37	0.00	1.96	1.33
mp-21381	{'Th': 1.0, 'Pb': 3.0}	4	11.86	119.51	17	59	0.00	1.95	1.33
mp-715493	{'V': 8.0, 'O': 14.0}	22	4.02	260.83	34	74	1.01	2.08	1.33
mp-21188	{'Ce': 2.0, 'Ni': 2.0}	4	8.09	81.65	14	73	0.00	1.74	1.33
mp-978268	{'Mg': 2.0, 'Zn': 2.0}	4	4.10	72.61	14	51	0.00	2.03	1.32
mp-1013582	{'Ba': 3.0, 'Sb': 2.0}	5	3.95	275.58	11	20	0.00	1.89	1.32
mp-569849	{'Li': 30.0, 'Si': 8.0}	38	1.22	589.80	21	30	0.00	1.67	1.32
mp-1136	{'Na': 6.0, 'As': 2.0}	8	2.34	204.30	14	22	0.09	1.94	1.32
mp-820	{'Hg': 1.0, 'Se': 1.0}	2	7.52	61.75	13	41	0.12	2.26	1.32
mp-979963	{'Yb': 3.0, 'Ti': 1.0}	4	7.26	129.73	14	21	0.00	1.92	1.32
mp-7493	{'Ca': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	5.41	174.16	17	35	0.00	2.06	1.32
mp-568411	{'Th': 4.0, 'Ga': 2.0}	6	10.62	166.87	20	73	0.00	1.97	1.32
mp-979465	{'Sm': 2.0, 'Cd': 6.0}	8	8.13	199.15	21	56	0.00	1.94	1.32
mp-21859	{'Cu': 2.0, 'As': 4.0}	6	6.47	109.45	23	87	0.00	2.29	1.31
mp-2452	{'P': 4.0, 'O': 10.0}	14	2.51	187.95	22	40	5.20	2.01	1.31
mp-23193	{'K': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	1.90	65.03	9	16	5.04	2.40	1.31
mp-19908	{'Eu': 4.0, 'F': 12.0}	16	6.52	212.85	36	86	0.00	2.19	1.31
mp-972954	{'Mg': 2.0, 'Cd': 4.0}	6	6.24	132.51	17	43	0.00	1.91	1.31
mp-1039073	{'Mg': 3.0, 'Bi': 1.0}	4	4.72	99.18	13	40	0.00	1.96	1.31
mp-1070	{'Cd': 2.0, 'Se': 2.0}	4	5.30	119.89	15	44	0.56	2.18	1.31
mp-771359	{'Cu': 16.0, 'O': 24.0}	40	5.71	407.42	56	160	0.00	2.23	1.31
mp-11243	{'Er': 2.0, 'Au': 2.0}	4	12.86	94.03	19	95	0.00	2.03	1.31

mp-9563	{'Li': 12.0, 'Sb': 6.0}	18	3.76	359.65	23	32	0.00	1.83	1.30
mp-865604	{'Li': 5.0, 'Mg': 1.0}	6	0.82	120.06	8	17	0.00	1.76	1.30
mp-1018087	{'Ce': 2.0, 'Au': 2.0}	4	10.66	105.03	18	66	0.00	2.07	1.30
mp-568920	{'Ca': 1.0, 'Au': 5.0}	6	13.86	122.84	27	99	0.00	2.20	1.30
mp-975909	{'Li': 1.0, 'Au': 3.0}	4	14.55	68.21	25	95	0.00	2.27	1.30
mp-758104	{'Mn': 11.0, 'Pd': 21.0}	32	9.67	487.57	56	142	0.00	2.25	1.30
mp-8628	{'Te': 4.0, 'Pt': 3.0}	7	10.55	172.37	27	49	0.00	2.27	1.30
mp-12751	{'Pu': 2.0, 'Ni': 2.0}	4	13.00	77.33	17	79	0.00	1.79	1.30
mp-33018	{'Rb': 3.0, 'Sb': 1.0}	4	3.48	180.50	11	7	0.62	2.01	1.30
mp-867134	{'Sm': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	4.15	177.26	16	42	0.00	2.13	1.30
mp-974415	{'Re': 3.0, 'Pb': 1.0}	4	18.77	67.73	21	346	0.00	1.90	1.29
mp-973933	{'Ni': 2.0, 'N': 2.0}	4	5.98	40.41	17	228	0.00	1.98	1.29
mp-862260	{'Sc': 2.0, 'Zn': 6.0}	8	6.03	132.80	24	78	0.00	2.18	1.29
mp-1498	{'Al': 42.0, 'Pd': 16.0}	58	5.11	921.73	50	109	0.00	2.02	1.29
mp-2151	{'Mg': 17.0, 'Al': 12.0}	29	2.09	584.22	24	50	0.00	1.90	1.29
mp-7812	{'Ge': 4.0, 'O': 8.0}	12	3.68	188.71	25	23	3.29	2.15	1.29
mp-1052	{'Na': 2.0, 'Au': 4.0}	6	10.95	126.43	24	69	0.00	2.15	1.29
mp-1009540	{'Os': 1.0, 'C': 1.0}	2	13.69	24.53	18	256	0.17	2.18	1.28
mp-568662	{'Ba': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	3.39	101.87	11	28	5.61	2.19	1.28
mp-2103	{'Cu': 1.0, 'Au': 3.0}	4	16.32	66.59	28	143	0.00	2.39	1.28
mp-30594	{'Cu': 16.0, 'Pd': 4.0}	20	9.49	252.45	49	146	0.00	2.33	1.28
mp-341	{'Pb': 1.0, 'F': 4.0}	5	5.81	80.97	23	31	2.00	2.42	1.28
mp-1018107	{'Zr': 1.0, 'Te': 2.0}	3	5.98	96.17	13	14	0.00	2.11	1.28
mp-1821	{'W': 2.0, 'Se': 4.0}	6	7.86	144.46	20	20	1.51	2.06	1.28
mp-979014	{'Sr': 1.0, 'Ac': 3.0}	4	6.82	187.04	13	22	0.00	2.00	1.27
mp-314	{'Th': 6.0, 'Ge': 4.0}	10	10.50	266.12	24	85	0.00	1.93	1.27
mp-319	{'Sm': 4.0, 'Tl': 2.0}	6	9.22	181.96	19	46	0.00	2.02	1.27
mp-30423	{'V': 2.0, 'Au': 4.0}	6	14.57	101.39	30	126	0.00	2.29	1.27
mp-977	{'Lu': 1.0, 'In': 3.0}	4	8.80	98.01	18	57	0.00	2.17	1.27
mp-1525	{'Ce': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.98	63.71	10	53	0.00	1.96	1.27
mp-1828	{'Th': 2.0, 'Os': 4.0}	6	17.61	115.53	28	213	0.00	2.15	1.26
mp-21483	{'Nd': 3.0, 'In': 1.0}	4	7.31	124.42	13	36	0.00	1.86	1.26
mp-30768	{'Li': 14.0, 'Sn': 6.0}	20	3.65	367.86	23	31	0.00	1.78	1.26
mp-23162	{'Zr': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	3.86	69.82	12	18	0.86	2.13	1.26
mp-8936	{'Sn': 2.0, 'Se': 2.0}	4	2.91	225.69	10	6	1.62	2.05	1.26
mp-11644	{'Li': 4.0, 'Ca': 2.0}	6	1.08	166.37	8	16	0.00	1.77	1.26
mp-11693	{'Te': 2.0, 'Pt': 2.0}	4	11.16	96.00	21	48	0.00	2.27	1.26
mp-30871	{'Ta': 6.0, 'Sn': 2.0}	8	14.55	151.03	27	179	0.00	2.00	1.25
mp-30846	{'Sn': 6.0, 'Pt': 4.0}	10	11.12	222.90	32	102	0.00	2.28	1.25
mp-564	{'Te': 2.0, 'Pd': 2.0}	4	8.80	88.34	20	98	0.00	2.31	1.25
mp-21321	{'Mn': 4.0, 'Se': 8.0}	12	6.03	234.30	27	77	0.00	2.17	1.25
mp-976772	{'Ni': 1.0, 'Ag': 3.0}	4	9.85	64.43	24	64	0.00	2.41	1.25
mp-2234	{'Er': 12.0, 'S': 18.0}	30	6.12	700.90	33	69	1.47	1.90	1.25
mp-30778	{'Mg': 20.0, 'Rh': 8.0}	28	4.19	519.38	32	71	0.00	2.02	1.25
mp-1866	{'K': 1.0, 'O': 2.0}	3	2.22	53.24	10	25	0.00	2.07	1.25
mp-8093	{'Ba': 2.0, 'Cd': 1.0}	3	4.50	142.70	9	14	0.00	1.87	1.24
mp-2604	{'Mg': 4.0, 'Te': 8.0}	12	5.17	359.26	22	38	1.51	2.07	1.24
mp-976122	{'Ge': 3.0, 'Sb': 1.0}	4	6.49	86.91	16	79	0.00	2.13	1.24
mp-31349	{'Sr': 3.0, 'In': 1.0}	4	3.85	162.87	10	68	0.00	1.91	1.24
mp-13051	{'Sr': 4.0, 'Si': 2.0}	6	3.52	191.66	12	31	0.00	1.85	1.24
mp-1808	{'Ti': 16.0, 'Ni': 8.0}	24	5.73	358.33	36	141	0.00	2.09	1.24

mvc-6389	{'W': 4.0, 'O': 8.0}	12	8.27	173.31	29	116	0.35	2.04	1.24
mp-2698	{'Y': 2.0, 'Cu': 4.0}	6	6.71	106.96	22	80	0.00	2.26	1.23
mp-990084	{'Na': 2.0, 'Cl': 1.0}	3	1.50	90.22	8	13	0.00	2.11	1.23
mp-557	{'Te': 4.0, 'O': 8.0}	12	5.64	188.09	28	30	2.90	2.16	1.23
mp-30410	{'Mn': 2.0, 'Au': 5.0}	7	15.08	120.58	32	127	0.00	2.31	1.23
mp-1018809	{'Mo': 2.0, 'S': 4.0}	6	4.31	123.45	17	25	1.34	2.12	1.23
mp-2097	{'Sn': 2.0, 'O': 2.0}	4	5.94	75.29	20	32	0.63	2.44	1.23
mp-762	{'Pt': 1.0, 'S': 2.0}	3	6.20	69.38	14	21	1.44	2.14	1.23
mp-506	{'Mg': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	6.69	32.43	12	94	0.00	2.07	1.22
mp-23183	{'Nd': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	3.97	209.48	18	34	4.30	2.15	1.22
mp-30352	{'Na': 2.0, 'Ag': 4.0}	6	6.08	130.47	21	67	0.00	2.31	1.22
mp-11248	{'Li': 1.0, 'Au': 3.0}	4	14.69	67.60	24	99	0.00	2.27	1.22
mp-10260	{'Ni': 3.0, 'Sb': 1.0}	4	9.54	51.83	12	165	0.00	1.37	1.22
mp-1008617	{'Yb': 1.0, 'Ag': 2.0}	3	9.88	65.31	18	54	0.00	2.30	1.22
mp-865176	{'Hf': 1.0, 'Cu': 3.0}	4	10.78	56.87	23	133	0.00	2.31	1.21
mp-560236	{'Mg': 2.0, 'F': 4.0}	6	1.91	108.49	12	50	6.29	2.00	1.21
mp-568654	{'Pr': 1.0, 'Ag': 2.0}	3	8.04	73.69	17	57	0.00	2.37	1.21
mp-978286	{'Mg': 3.0, 'Mn': 1.0}	4	2.67	79.37	11	44	0.00	2.01	1.21
mp-569858	{'U': 2.0, 'Bi': 4.0}	6	12.02	181.27	22	56	0.00	2.15	1.21
mp-753	{'Zn': 8.0, 'Sb': 8.0}	16	6.14	404.68	28	48	0.08	2.13	1.21
mp-980001	{'Yb': 1.0, 'Pr': 3.0}	4	6.86	144.22	14	27	0.00	2.08	1.21
mp-862716	{'Li': 1.0, 'Ag': 3.0}	4	7.90	69.49	21	62	0.00	2.39	1.21
mp-975904	{'Li': 3.0, 'Cd': 1.0}	4	2.97	74.46	10	19	0.00	1.78	1.20
mp-1006882	{'Cd': 1.0, 'C': 1.0}	2	5.92	34.88	10	81	0.00	1.90	1.20
mp-568419	{'Mg': 18.0, 'Ir': 6.0}	24	5.88	449.12	31	76	0.00	1.95	1.20
mp-471	{'Cd': 2.0, 'As': 4.0}	6	5.49	158.60	18	33	0.19	2.20	1.19
mp-1018794	{'Mg': 4.0, 'Ge': 2.0}	6	3.40	118.51	14	42	0.00	1.98	1.19
mp-985303	{'Ac': 6.0, 'Th': 2.0}	8	9.15	331.37	20	31	0.00	2.06	1.19
mp-1002136	{'La': 2.0, 'Au': 2.0}	4	9.89	112.78	16	65	0.00	2.05	1.19
mp-672265	{'Cu': 21.0, 'Pd': 7.0}	28	9.62	358.97	54	148	0.00	2.32	1.19
mp-17783	{'Mg': 18.0, 'Au': 6.0}	24	5.48	490.42	30	57	0.00	1.96	1.19
mp-32887	{'Hf': 1.0, 'Te': 2.0}	3	6.75	106.68	12	15	0.00	2.04	1.19
mp-1557	{'Mg': 18.0, 'Au': 6.0}	24	5.48	490.95	30	57	0.00	1.97	1.19
mp-1023934	{'Mo': 1.0, 'Se': 2.0}	3	2.48	169.91	8	12	1.43	2.10	1.18
mp-981391	{'Hg': 3.0, 'Ir': 1.0}	4	16.63	79.30	25	130	0.00	2.35	1.18
mp-2816	{'Nd': 4.0, 'Tl': 2.0}	6	8.68	188.60	17	44	0.00	1.97	1.18
mp-1891	{'Sm': 1.0, 'Al': 4.0}	5	4.19	102.31	13	73	0.00	1.92	1.18
mp-30579	{'Er': 1.0, 'Cu': 5.0}	6	9.42	85.49	26	123	0.00	2.31	1.18
mp-7834	{'Ta': 1.0, 'Se': 2.0}	3	7.76	72.52	14	31	0.00	2.10	1.18
mp-20136	{'Ba': 2.0, 'Pb': 2.0}	4	6.69	171.10	13	25	0.00	2.06	1.18
mp-1038837	{'Ce': 1.0, 'Mg': 3.0}	4	3.24	109.18	10	20	0.00	1.88	1.18
mvc-13442	{'Cu': 4.0, 'S': 2.0}	6	6.24	84.77	23	101	0.00	2.34	1.18
mp-2730	{'Hg': 1.0, 'Te': 1.0}	2	7.38	73.87	12	36	0.00	2.32	1.18
mp-981214	{'Sr': 1.0, 'Mg': 5.0}	6	2.07	167.90	10	31	0.00	1.86	1.18
mp-864934	{'Mg': 2.0, 'Ag': 6.0}	8	7.98	144.74	29	78	0.00	2.44	1.17
mp-250	{'Mg': 4.0, 'Ge': 2.0}	6	3.08	130.61	13	42	0.00	1.97	1.17
mp-1038972	{'Mg': 1.0, 'Cd': 1.0}	2	5.01	45.27	9	14	0.00	1.90	1.17
mp-980052	{'Yb': 3.0, 'In': 1.0}	4	8.42	125.02	14	24	0.00	1.96	1.17
mp-2150	{'Ba': 2.0, 'Te': 4.0}	6	5.44	239.53	15	28	0.40	2.09	1.17
mp-1007918	{'Dy': 2.0, 'Au': 2.0}	4	12.43	96.01	18	87	0.00	2.08	1.17
mp-685055	{'Cr': 1.0, 'Te': 2.0}	3	6.45	79.04	14	30	0.00	2.23	1.17

mp-879	{'La': 6.0, 'Te': 8.0}	14	6.78	454.38	23	51	0.00	2.00	1.17
mp-11489	{'Li': 3.0, 'Pd': 1.0}	4	3.58	59.08	11	37	0.00	1.80	1.17
mp-979273	{'Te': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.77	68.87	21	136	0.00	2.28	1.17
mp-21163	{'Si': 4.0, 'Pt': 12.0}	16	16.78	242.83	42	198	0.00	2.13	1.16
mp-1229	{'Cu': 2.0, 'F': 4.0}	6	4.75	70.94	21	59	0.00	2.28	1.16
mp-1486	{'Zn': 1.0, 'Ni': 1.0}	2	8.55	24.12	12	95	0.00	1.90	1.16
mp-985059	{'Ac': 1.0, 'La': 3.0}	4	6.85	155.94	13	27	0.00	2.03	1.16
mp-22646	{'In': 4.0, 'Pd': 8.0}	12	10.61	205.13	33	128	0.00	2.22	1.16
mp-2194	{'Ti': 1.0, 'Se': 2.0}	3	4.69	72.82	12	16	0.00	2.12	1.16
mp-20662	{'Sn': 8.0, 'Pt': 2.0}	10	9.02	246.60	29	59	0.00	2.34	1.16
mp-972908	{'La': 3.0, 'Dy': 1.0}	4	6.79	141.64	13	28	0.00	2.01	1.16
mp-2672	{'K': 4.0, 'O': 4.0}	8	2.31	158.28	15	32	2.40	2.11	1.16
mp-628	{'Zr': 4.0, 'Co': 2.0}	6	7.17	111.79	20	107	0.00	2.17	1.16
mp-7582	{'Ge': 2.0, 'S': 4.0}	6	2.98	152.31	14	21	2.60	2.14	1.16
mp-334	{'La': 6.0, 'F': 18.0}	24	5.81	335.92	38	101	6.02	2.20	1.16
mp-542429	{'Mg': 18.0, 'Rh': 6.0}	24	3.87	452.98	27	66	0.00	1.99	1.15
mp-861	{'Hf': 4.0, 'Ni': 2.0}	6	12.85	107.44	20	130	0.00	1.87	1.15
mp-1984	{'Ta': 2.0, 'S': 4.0}	6	6.11	133.11	17	29	0.00	2.04	1.15
mp-7597	{'Nb': 1.0, 'Se': 2.0}	3	5.66	73.56	13	22	0.00	2.18	1.14
mp-2168	{'Sn': 2.0, 'Se': 2.0}	4	5.92	110.81	14	28	0.61	2.12	1.14
mp-10187	{'Te': 2.0, 'Ir': 2.0}	4	12.81	82.92	22	176	0.00	2.35	1.14
mp-7474	{'Cu': 4.0, 'As': 2.0}	6	7.82	85.84	25	108	0.00	2.39	1.14
mp-6997	{'Sb': 6.0, 'Te': 3.0}	9	6.28	294.32	21	32	0.01	2.21	1.14
mp-553432	{'Ti': 3.0, 'O': 6.0}	9	2.38	167.36	14	14	3.42	1.88	1.13
mp-1017507	{'Tm': 2.0, 'Au': 2.0}	4	13.12	92.62	18	89	0.00	2.07	1.13
mp-22735	{'Ca': 8.0, 'Sn': 4.0}	12	3.41	387.07	16	29	0.06	1.92	1.13
mp-1018150	{'Nb': 1.0, 'Te': 2.0}	3	6.80	84.96	14	18	0.00	2.24	1.13
mp-20061	{'Ge': 3.0, 'Pt': 6.0}	9	16.17	142.56	33	177	0.00	2.21	1.13
mp-30610	{'Er': 8.0, 'Pt': 4.0}	12	11.99	293.42	25	73	0.00	1.89	1.13
mp-2001	{'La': 1.0, 'Tl': 3.0}	4	10.56	118.21	18	44	0.00	2.25	1.12
mp-21893	{'Mn': 4.0, 'Te': 8.0}	12	6.87	299.85	25	49	0.00	2.17	1.12
mp-849060	{'V': 1.0, 'S': 2.0}	3	1.90	100.40	8	10	0.00	2.10	1.12
mp-976010	{'Li': 3.0, 'Cr': 1.0}	4	1.66	72.91	8	25	0.00	1.81	1.12
mp-1340	{'Ga': 4.0, 'Se': 6.0}	10	4.77	262.15	19	28	1.68	2.07	1.12
mp-867229	{'Rb': 2.0, 'Sn': 6.0}	8	4.86	301.77	17	43	0.00	2.18	1.12
mp-1007666	{'Ho': 2.0, 'Au': 2.0}	4	12.68	94.82	17	89	0.00	2.02	1.12
mp-634105	{'H': 1.0, 'Br': 1.0}	2	2.33	57.63	7	10	1.50	2.03	1.12
mp-2410	{'Sr': 1.0, 'Ag': 5.0}	6	7.70	135.16	23	59	0.00	2.43	1.12
mvc-14941	{'Mo': 4.0, 'O': 12.0}	16	4.18	228.86	27	38	1.84	2.15	1.11
mp-18316	{'Mg': 16.0, 'Pd': 8.0}	24	4.60	447.45	28	69	0.00	1.99	1.11
mp-1775	{'Sn': 2.0, 'Au': 2.0}	4	10.94	95.79	20	72	0.00	2.34	1.11
mp-1023924	{'Mo': 1.0, 'S': 2.0}	3	1.73	153.72	7	12	1.66	2.12	1.11
mp-1013525	{'V': 2.0, 'S': 4.0}	6	3.02	126.39	14	22	0.00	2.12	1.11
mp-624668	{'Ba': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	5.77	219.20	15	26	0.00	2.09	1.11
mp-7623	{'Mg': 4.0, 'As': 16.0}	20	4.46	482.42	25	43	0.84	2.04	1.11
mp-589	{'Tb': 2.0, 'Fe': 4.0}	6	9.24	97.27	20	103	0.00	2.04	1.10
mp-984705	{'Er': 1.0, 'Ru': 3.0}	4	11.92	65.56	21	180	0.00	2.27	1.10
mp-8200	{'Ag': 4.0, 'P': 8.0}	12	4.86	232.08	26	62	0.66	2.34	1.10
mp-8426	{'K': 2.0, 'Se': 1.0}	3	2.24	116.70	8	16	2.09	2.11	1.10
mp-976292	{'Na': 1.0, 'Cu': 1.0}	2	4.16	34.57	10	38	0.00	2.15	1.10
mp-569426	{'Sr': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	4.96	146.21	15	35	0.00	2.04	1.10

mp-23715	{'Ba': 4.0, 'H': 8.0}	12	4.11	225.39	17	30	2.87	1.77	1.10
mp-1025526	{'Lu': 2.0, 'Au': 6.0}	8	16.28	156.23	31	111	0.00	2.29	1.09
mp-972310	{'Tb': 6.0, 'Si': 2.0}	8	8.40	199.70	17	58	0.00	1.81	1.09
mp-23211	{'Pr': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	3.85	213.07	17	34	4.35	2.20	1.09
mp-18856	{'Mo': 8.0, 'O': 24.0}	32	4.12	464.28	36	33	1.65	2.14	1.08
mp-10744	{'Si': 6.0, 'Pt': 4.0}	10	9.67	163.00	25	161	0.00	2.04	1.08
mp-23268	{'Na': 1.0, 'I': 1.0}	2	3.57	69.68	8	16	3.57	2.13	1.08
mp-23201	{'Ba': 1.0, 'Bi': 3.0}	4	9.15	138.75	15	39	0.00	2.15	1.08
mp-685022	{'Te': 4.0, 'Pb': 4.0}	8	7.92	280.85	19	37	0.73	2.11	1.08
mp-23214	{'Ca': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	2.12	173.81	11	19	5.62	2.07	1.08
mp-979938	{'Yb': 3.0, 'Tc': 1.0}	4	10.38	98.74	15	31	0.00	1.97	1.08
mp-1907	{'Ti': 1.0, 'Te': 2.0}	3	5.97	84.33	12	18	0.00	2.13	1.08
mp-1831	{'Sr': 1.0, 'Au': 5.0}	6	13.42	132.72	24	90	0.00	2.25	1.07
mp-618991	{'Cu': 8.0, 'S': 4.0}	12	5.90	179.22	29	93	0.50	2.35	1.07
mp-1320	{'Ce': 4.0, 'Se': 8.0}	12	6.70	295.40	21	68	0.00	1.97	1.07
mp-22817	{'Ta': 2.0, 'Te': 8.0}	10	7.55	304.12	23	12	0.00	2.16	1.07
mp-981935	{'Li': 5.0, 'Mg': 1.0}	6	0.81	120.35	7	17	0.00	1.76	1.07
mp-336	{'Sm': 2.0, 'Co': 4.0}	6	9.31	95.70	21	115	0.00	2.14	1.07
mp-1411	{'Ta': 1.0, 'S': 2.0}	3	3.66	111.19	9	14	0.00	2.04	1.07
mp-975882	{'Li': 3.0, 'Cu': 1.0}	4	2.32	60.40	9	11	0.00	1.77	1.07
mp-980429	{'Sm': 6.0, 'Hg': 2.0}	8	9.17	236.00	18	44	0.00	1.91	1.07
mp-10033	{'Nb': 2.0, 'S': 4.0}	6	4.02	129.75	15	23	0.00	2.12	1.07
mp-694	{'V': 1.0, 'Se': 2.0}	3	5.09	68.19	12	16	0.00	2.14	1.07
mp-1018026	{'Li': 2.0, 'Ag': 2.0}	4	5.73	66.59	15	44	0.00	2.15	1.06
mp-22913	{'Cu': 1.0, 'Br': 1.0}	2	5.15	46.27	12	43	0.49	2.45	1.06
mp-2729	{'Sn': 14.0, 'Os': 6.0}	20	10.83	429.64	42	120	0.00	2.39	1.06
mp-9399	{'Sm': 2.0, 'Te': 6.0}	8	6.79	260.68	18	10	0.00	2.03	1.06
mp-1937	{'Yb': 4.0, 'Cu': 4.0}	8	9.05	173.61	22	40	0.00	2.11	1.06
mp-685146	{'Cd': 2.0, 'Te': 2.0}	4	5.48	145.52	13	35	0.62	2.22	1.06
mp-11554	{'Zr': 1.0, 'Pt': 1.0}	2	12.53	37.94	14	166	0.00	2.19	1.06
mp-23289	{'K': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	2.19	56.59	8	30	4.82	2.34	1.06
mp-580364	{'Ho': 1.0, 'Cu': 5.0}	6	9.30	86.21	24	121	0.00	2.31	1.06
mp-752735	{'Pd': 1.0, 'O': 2.0}	3	7.24	31.74	19	211	0.00	2.46	1.06
mp-973824	{'Li': 1.0, 'Hg': 3.0}	4	10.97	92.11	17	33	0.00	2.12	1.06
mp-7262	{'Zn': 8.0, 'As': 16.0}	24	4.90	583.55	29	51	0.22	2.15	1.05
mp-977181	{'Na': 1.0, 'Mo': 3.0}	4	7.84	65.84	16	120	0.00	2.12	1.05
mp-18707	{'Mg': 18.0, 'Pt': 6.0}	24	5.79	461.28	28	70	0.00	1.94	1.05
mp-281	{'Yb': 2.0, 'Co': 4.0}	6	10.76	89.79	22	85	0.00	2.13	1.05
mp-12779	{'Cd': 2.0, 'Te': 2.0}	4	5.47	145.82	13	35	0.62	2.24	1.05
mp-12581	{'Cd': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.53	61.02	10	29	0.00	2.16	1.05
mp-31503	{'Mg': 18.0, 'Sn': 10.0}	28	3.94	684.28	25	43	0.00	1.94	1.04
mp-2071	{'Zn': 24.0, 'P': 16.0}	40	4.54	756.17	35	65	0.61	2.05	1.04
mp-2280	{'Cu': 4.0, 'Se': 8.0}	12	6.30	233.61	26	65	0.00	2.27	1.04
mp-1990	{'Mg': 24.0, 'As': 16.0}	40	3.05	970.89	27	50	1.43	1.95	1.04
mvc-15	{'Cr': 4.0, 'S': 8.0}	12	3.64	211.98	21	46	0.00	2.19	1.04
mp-985282	{'Ag': 3.0, 'Ge': 1.0}	4	9.12	72.14	21	75	0.00	2.48	1.04
mp-1030	{'Sb': 1.0, 'Pt': 7.0}	8	18.87	130.91	32	210	0.00	2.26	1.04
mp-864935	{'Mg': 2.0, 'Au': 6.0}	8	14.27	143.15	29	112	0.00	2.28	1.04
mp-6950	{'Ba': 2.0, 'Sb': 6.0}	8	5.80	287.63	17	27	0.00	2.13	1.04
mp-2648	{'Nb': 1.0, 'S': 2.0}	3	2.33	112.09	8	13	0.00	2.13	1.04
mp-8094	{'Ba': 2.0, 'Hg': 1.0}	3	5.68	139.00	9	16	0.00	1.94	1.03

mp-18345	{'La': 20.0, 'Si': 16.0}	36	5.33	1006.10	28	58	0.00	1.85	1.03
mp-1326	{'Nb': 6.0, 'Sn': 2.0}	8	8.69	151.81	22	164	0.00	2.15	1.03
mp-22896	{'La': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	3.72	219.04	16	32	3.67	2.19	1.03
mp-1025478	{'Tb': 2.0, 'Au': 6.0}	8	15.22	163.67	27	95	0.00	2.19	1.03
mp-974789	{'Rb': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	3.08	202.20	9	1	0.00	1.97	1.03
mp-570749	{'Yb': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	12.49	76.34	14	39	0.00	2.03	1.03
mp-20196	{'Nb': 2.0, 'Te': 8.0}	10	6.58	304.71	21	35	0.00	2.20	1.03
mp-568867	{'Si': 12.0, 'N': 16.0}	28	3.13	297.65	27	190	2.33	1.95	1.02
mp-1356	{'Sb': 8.0, 'Pd': 4.0}	12	8.22	282.91	28	84	0.00	2.34	1.02
mp-2630	{'Sr': 1.0, 'C': 2.0}	3	3.19	58.11	8	48	1.77	1.80	1.02
mp-22344	{'Sn': 14.0, 'Ru': 6.0}	20	8.85	425.76	38	110	0.00	2.39	1.02
mp-1646	{'Li': 3.0, 'Hg': 1.0}	4	5.23	70.25	11	26	0.00	1.80	1.01
mp-973271	{'K': 3.0, 'Y': 1.0}	4	1.52	225.78	6	5	0.00	1.85	1.01
mp-865858	{'Pa': 1.0, 'Au': 3.0}	4	16.32	83.64	20	126	0.00	2.20	1.01
mp-755435	{'Tl': 4.0, 'Au': 2.0}	6	11.97	168.09	22	77	0.00	2.32	1.01
mp-582011	{'Ce': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	3.84	213.30	16	31	0.01	2.19	1.01
mp-977224	{'Pr': 1.0, 'As': 3.0}	4	6.80	89.23	13	73	0.00	2.02	1.01
mp-973155	{'Ge': 6.0, 'C': 2.0}	8	5.97	127.82	17	88	0.00	1.91	1.01
mp-2347	{'Ni': 2.0, 'As': 2.0}	4	7.28	60.96	11	112	0.00	1.61	1.01
mp-20296	{'In': 8.0, 'Co': 4.0}	12	8.58	223.44	27	89	0.00	2.20	1.01
mp-23164	{'Bi': 8.0, 'Se': 12.0}	20	7.18	606.10	28	17	1.09	2.09	1.01
mp-504	{'Cu': 6.0, 'S': 6.0}	12	4.64	205.23	25	80	0.00	2.36	1.00
mp-16775	{'Cd': 4.0, 'Cu': 8.0}	12	8.92	178.26	31	100	0.00	2.31	1.00
mp-569558	{'Al': 4.0, 'Au': 8.0}	12	13.67	204.55	32	118	0.00	2.20	1.00
mp-1043	{'Hf': 2.0, 'V': 4.0}	6	9.51	97.86	21	142	0.00	2.21	1.00
mp-23313	{'In': 2.0, 'Bi': 2.0}	4	8.68	123.90	16	33	0.00	2.30	1.00
mp-11523	{'Ni': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	9.42	51.94	11	163	0.00	1.44	1.00
mp-865716	{'Yb': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	4.77	169.74	14	36	5.40	2.11	1.00
mp-864794	{'Zn': 1.0, 'Ag': 3.0}	4	9.37	68.95	20	90	0.00	2.43	0.99
mp-10293	{'Ba': 2.0, 'C': 4.0}	6	3.74	143.23	11	40	2.13	1.83	0.99
mp-23295	{'Rb': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	2.67	75.15	8	15	5.02	2.38	0.99
mp-1533	{'Nd': 3.0, 'Tl': 1.0}	4	8.46	125.08	12	42	0.00	1.91	0.99
mp-2654	{'Al': 12.0, 'S': 18.0}	30	2.29	653.93	22	33	3.24	1.98	0.99
mp-567724	{'Ta': 1.0, 'Se': 2.0}	3	7.37	76.39	12	34	0.00	2.10	0.99
mp-627	{'Np': 1.0, 'Se': 1.0}	2	10.71	48.98	10	83	0.00	1.91	0.99
mp-2393	{'Y': 1.0, 'Tl': 3.0}	4	10.63	109.68	16	55	0.00	2.19	0.99
mp-16860	{'Mg': 26.0, 'Ir': 6.0}	32	4.66	635.77	28	60	0.00	1.93	0.98
mp-11571	{'Y': 1.0, 'Sn': 3.0}	4	6.99	105.66	14	62	0.00	2.20	0.98
mp-1492	{'Cd': 3.0, 'Te': 3.0}	6	6.15	194.48	16	33	0.02	2.24	0.98
mp-604910	{'Mn': 2.0, 'Se': 2.0}	4	5.45	81.55	13	24	0.00	2.10	0.97
mp-864901	{'La': 2.0, 'Au': 6.0}	8	13.19	183.76	24	76	0.00	2.18	0.97
mp-20943	{'Te': 1.0, 'Pb': 1.0}	2	8.67	64.11	10	40	0.00	2.12	0.97
mp-568273	{'Li': 2.0, 'I': 2.0}	4	4.08	108.91	11	20	4.24	2.10	0.97
mp-31277	{'Sn': 16.0, 'Ir': 4.0}	20	9.27	477.97	36	72	0.00	2.36	0.97
mp-11299	{'Cd': 2.0, 'Hg': 1.0}	3	9.77	72.31	13	37	0.00	2.08	0.97
mp-12712	{'Zr': 6.0, 'Pd': 8.0}	14	8.96	259.22	29	145	0.00	2.23	0.96
mp-863677	{'Pm': 2.0, 'Cu': 6.0}	8	7.78	143.24	22	79	0.00	2.24	0.96
mp-2242	{'Ge': 4.0, 'S': 4.0}	8	3.95	175.87	17	21	1.24	2.23	0.96
mp-19762	{'U': 1.0, 'Pb': 3.0}	4	12.60	113.32	14	127	0.00	1.95	0.96
mp-11365	{'Ti': 3.0, 'Cu': 1.0}	4	5.51	62.48	15	127	0.00	2.27	0.96
mp-731	{'Mg': 6.0, 'Hg': 2.0}	8	5.06	179.42	15	43	0.00	1.96	0.96

mp-1170	{'Sn': 1.0, 'S': 2.0}	3	3.67	82.73	10	15	1.56	2.21	0.95
mp-20760	{'La': 4.0, 'In': 2.0}	6	6.60	197.44	14	72	0.00	2.06	0.95
mp-20900	{'Cu': 6.0, 'Sb': 2.0}	8	8.72	119.02	25	95	0.00	2.33	0.95
mp-21342	{'V': 6.0, 'Sn': 2.0}	8	7.37	122.39	22	163	0.00	2.24	0.95
mp-2085	{'Pr': 2.0, 'Co': 4.0}	6	8.72	98.55	19	117	0.00	2.15	0.95
mp-30822	{'Pu': 2.0, 'Os': 4.0}	6	19.96	103.92	25	242	0.00	2.17	0.95
mp-568746	{'Bi': 4.0, 'Pd': 2.0}	6	11.10	156.94	19	55	0.00	2.18	0.95
mp-1209	{'Rb': 1.0, 'Au': 5.0}	6	12.95	137.25	22	63	0.00	2.27	0.94
mp-978272	{'Mg': 3.0, 'Br': 1.0}	4	2.49	101.78	9	19	0.00	2.05	0.94
mp-555599	{'Cu': 6.0, 'S': 6.0}	12	4.64	205.17	24	74	0.00	2.36	0.94
mp-1233	{'Cu': 12.0, 'Sn': 10.0}	22	8.06	401.62	37	81	0.00	2.34	0.94
mp-570197	{'Bi': 2.0, 'Pd': 1.0}	3	11.39	76.44	14	55	0.00	2.17	0.94
mp-1008601	{'Zr': 1.0, 'Ag': 2.0}	3	8.77	58.13	17	116	0.00	2.51	0.94
mp-30839	{'Th': 3.0, 'Pd': 5.0}	8	11.45	178.07	21	92	0.00	2.08	0.94
mp-972352	{'Yb': 1.0, 'Mg': 1.0}	2	5.33	61.52	7	27	0.00	1.84	0.94
mp-976843	{'Li': 4.0, 'Mg': 2.0}	6	1.03	122.86	7	228	0.00	1.81	0.94
mp-2051	{'La': 1.0, 'Cu': 2.0}	3	7.12	62.06	13	83	0.00	2.24	0.94
mp-570466	{'Li': 8.0, 'Ca': 4.0}	12	1.08	330.87	9	16	0.00	1.77	0.94
mp-11493	{'Lu': 1.0, 'Pb': 2.0}	3	11.26	86.95	12	49	0.00	2.00	0.94
mp-2757	{'Cd': 1.0, 'Au': 1.0}	2	13.04	39.38	13	88	0.00	2.19	0.93
mp-8073	{'As': 4.0, 'Pd': 8.0}	12	9.95	192.00	29	122	0.00	2.26	0.93
mp-1013736	{'Ba': 3.0, 'Bi': 2.0}	5	4.77	289.10	10	18	0.00	2.02	0.93
mp-13365	{'Sr': 4.0, 'Zn': 8.0}	12	5.24	276.87	19	35	0.00	2.05	0.93
mp-1784	{'Cs': 1.0, 'F': 1.0}	2	4.41	57.25	10	21	5.28	2.44	0.93
mp-999495	{'Na': 3.0, 'N': 1.0}	4	2.21	62.31	9	29	0.15	1.98	0.93
mp-974738	{'K': 1.0, 'Sr': 3.0}	4	2.15	233.05	6	16	0.00	1.82	0.93
mp-1009493	{'Np': 1.0, 'N': 1.0}	2	15.52	26.86	13	189	0.00	1.99	0.93
mp-570113	{'Bi': 2.0, 'Au': 4.0}	6	15.08	132.76	21	102	0.00	2.15	0.93
mp-7463	{'Cu': 18.0, 'P': 6.0}	24	7.34	300.98	40	123	0.00	2.36	0.92
mp-20486	{'Pu': 3.0, 'Ga': 1.0}	4	18.88	70.52	17	175	0.00	1.93	0.92
mp-30566	{'Ti': 4.0, 'Co': 2.0}	6	5.79	88.78	17	128	0.00	2.19	0.92
mp-20503	{'Gd': 1.0, 'Tl': 3.0}	4	11.52	111.06	16	61	0.00	2.23	0.92
mp-19764	{'Pr': 3.0, 'In': 1.0}	4	7.01	127.41	12	36	0.00	2.08	0.92
mp-1005727	{'Tm': 1.0, 'Np': 3.0}	4	14.85	98.41	15	46	0.00	1.96	0.91
mp-20599	{'Pd': 2.0, 'Pb': 4.0}	6	11.78	146.80	18	66	0.00	2.08	0.91
mp-20311	{'Fe': 2.0, 'Se': 2.0}	4	5.62	79.66	13	19	0.00	2.14	0.91
mp-665	{'Sn': 1.0, 'Se': 2.0}	3	5.12	89.71	10	15	0.80	2.13	0.91
mp-2231	{'Sn': 4.0, 'S': 4.0}	8	4.90	204.38	17	24	1.11	2.23	0.91
mp-1007690	{'Hg': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	19.32	67.55	22	104	0.00	2.30	0.91
mp-569346	{'Cu': 2.0, 'I': 2.0}	4	5.75	110.06	15	39	1.21	2.48	0.91
mp-867800	{'Ac': 2.0, 'Se': 6.0}	8	7.43	207.34	17	56	0.00	2.06	0.91
mp-22914	{'Cu': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	4.17	39.47	10	48	0.80	2.40	0.90
mp-1935	{'Ba': 4.0, 'Mg': 8.0}	12	3.03	407.47	13	22	0.00	1.91	0.90
mp-1008635	{'W': 1.0, 'C': 1.0}	2	12.45	26.11	11	249	0.00	1.87	0.90
mp-8700	{'K': 2.0, 'Au': 3.0}	5	7.82	142.11	15	35	0.00	2.19	0.90
mp-1025799	{'Mo': 3.0, 'Se': 6.0}	9	3.98	318.03	14	27	1.42	2.10	0.90
mp-1023939	{'Mo': 2.0, 'S': 4.0}	6	2.42	219.30	10	16	1.55	2.12	0.90
mp-1681	{'La': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	6.93	128.27	11	50	0.00	1.99	0.90
mp-568446	{'Er': 20.0, 'Si': 16.0}	36	7.78	809.81	29	79	0.00	1.80	0.89
mp-976784	{'Ni': 1.0, 'Au': 3.0}	4	16.50	65.36	21	147	0.00	2.31	0.89
mp-1777	{'Li': 30.0, 'Ge': 8.0}	38	2.14	612.69	19	28	0.00	1.64	0.89

mp-565203	{'Mn': 32.0, 'O': 48.0}	80	4.72	888.44	51	150	0.00	2.13	0.89
mp-1021674	{'Ni': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	5.13	30.46	7	6	0.00	1.63	0.89
mp-973622	{'K': 3.0, 'Sr': 1.0}	4	1.23	275.71	5	5	0.00	1.88	0.89
mp-973353	{'Sb': 1.0, 'Pt': 3.0}	4	16.98	69.14	20	201	0.00	2.25	0.89
mp-11465	{'Mg': 10.0, 'Hg': 6.0}	16	6.75	355.98	22	43	0.00	1.99	0.89
mp-7956	{'Na': 6.0, 'Sb': 2.0}	8	2.65	239.29	11	14	0.39	1.96	0.89
mp-12600	{'Pr': 4.0, 'Tl': 2.0}	6	8.41	192.00	16	43	0.00	2.18	0.89
mp-985295	{'Ag': 3.0, 'P': 1.0}	4	8.42	69.91	18	85	0.00	2.44	0.89
mp-796	{'Nb': 6.0, 'Al': 2.0}	8	7.16	141.85	18	162	0.00	2.07	0.89
mp-13679	{'Pd': 2.0, 'F': 6.0}	8	4.91	110.64	19	33	0.00	2.23	0.89
mp-10074	{'Ge': 2.0, 'Se': 4.0}	6	4.31	177.82	12	10	1.66	2.02	0.89
mp-15659	{'Sb': 4.0, 'Pt': 6.0}	10	13.93	197.54	27	135	0.00	2.23	0.89
mp-31086	{'Na': 4.0, 'P': 20.0}	24	2.30	513.26	19	35	1.55	2.02	0.88
mp-14112	{'Pd': 3.0, 'F': 9.0}	12	4.42	184.24	21	42	0.00	2.20	0.88
mp-973834	{'Pd': 1.0, 'Au': 3.0}	4	16.61	69.72	21	142	0.00	2.34	0.88
mp-978264	{'Mg': 2.0, 'W': 6.0}	8	14.08	135.78	23	151	0.00	2.09	0.88
mp-1201	{'Sb': 2.0, 'Te': 3.0}	5	6.12	169.89	13	18	0.16	2.16	0.88
mp-568495	{'Cu': 20.0, 'Sn': 6.0}	26	8.84	372.41	41	110	0.00	2.33	0.88
mp-983567	{'Ca': 2.0, 'Ac': 6.0}	8	6.73	355.86	14	23	0.00	2.00	0.88
mp-1404	{'Cd': 2.0, 'Au': 2.0}	4	13.13	78.26	17	90	0.00	2.18	0.88
mp-975383	{'Rb': 1.0, 'Ca': 3.0}	4	1.72	198.31	6	3	0.00	1.86	0.88
mp-7845	{'Zn': 6.0, 'As': 4.0}	10	5.44	211.28	18	47	0.02	2.11	0.87
mp-561543	{'Be': 6.0, 'F': 12.0}	18	1.49	313.71	14	8	7.96	1.86	0.87
mp-1021499	{'Cu': 8.0, 'Se': 4.0}	12	6.63	206.39	26	76	0.00	2.38	0.87
mp-23159	{'Sr': 1.0, 'Bi': 3.0}	4	9.07	130.85	13	42	0.00	2.13	0.87
mp-20119	{'Pt': 2.0, 'O': 4.0}	6	8.37	90.14	18	164	0.00	2.15	0.87
mp-1058	{'Pd': 2.0, 'F': 4.0}	6	5.62	85.39	18	94	0.00	2.32	0.87
mp-867879	{'Sm': 2.0, 'Hg': 6.0}	8	12.46	200.55	20	56	0.00	2.07	0.87
mp-23265	{'Gd': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	4.34	201.73	15	29	2.01	2.16	0.87
mp-1021511	{'Cd': 1.0, 'S': 1.0}	2	2.58	92.89	6	12	1.52	2.17	0.87
mp-2128	{'Sn': 8.0, 'Pd': 2.0}	10	7.73	249.64	23	56	0.00	2.37	0.87
mp-538	{'Ca': 2.0, 'Ag': 2.0}	4	4.47	109.95	11	20	0.00	2.17	0.86
mp-7547	{'Ba': 2.0, 'Se': 4.0}	6	4.76	206.19	12	30	1.17	2.09	0.86
mp-2406	{'Mg': 20.0, 'Pd': 8.0}	28	4.10	541.10	24	62	0.00	1.98	0.86
mp-1634	{'Mo': 2.0, 'Se': 4.0}	6	5.69	148.11	14	18	1.42	2.10	0.86
mp-613	{'Te': 4.0, 'Pd': 6.0}	10	9.40	203.00	24	97	0.00	2.29	0.86
mp-11251	{'Mg': 6.0, 'Au': 2.0}	8	5.07	176.94	14	49	0.00	1.96	0.86
mp-1023936	{'W': 1.0, 'Se': 2.0}	3	3.38	167.87	7	9	1.54	2.06	0.86
mp-11327	{'Rb': 2.0, 'Se': 1.0}	3	3.10	133.96	7	14	1.82	2.04	0.86
mp-7343	{'Y': 12.0, 'Pt': 4.0}	16	6.87	446.63	19	56	0.00	1.88	0.86
mp-9889	{'Ga': 2.0, 'S': 2.0}	4	3.39	99.66	10	15	1.95	2.14	0.85
mp-8041	{'Rb': 2.0, 'S': 1.0}	3	2.80	120.40	7	15	1.99	2.07	0.85
mp-30356	{'Sr': 2.0, 'Ag': 4.0}	6	6.33	159.05	17	41	0.00	2.39	0.85
mp-979038	{'Th': 3.0, 'O': 1.0}	4	11.48	103.01	13	70	0.00	1.97	0.85
mp-30434	{'Ba': 2.0, 'Tl': 4.0}	6	8.35	217.28	16	24	0.00	2.25	0.85
mp-30485	{'Ca': 6.0, 'Zn': 2.0}	8	2.25	274.30	9	22	0.00	1.85	0.85
mp-6912	{'Mn': 4.0, 'Sb': 2.0}	6	7.89	97.49	16	52	0.00	2.04	0.85
mp-545820	{'Sn': 4.0, 'O': 4.0}	8	5.84	153.19	21	34	0.74	2.44	0.85
mp-976280	{'Li': 2.0, 'Br': 2.0}	4	2.79	103.42	8	18	4.94	1.94	0.85
mp-11722	{'Pr': 2.0, 'Ge': 4.0}	6	6.64	143.07	13	60	0.00	1.95	0.85
mp-13444	{'Li': 6.0, 'Sn': 6.0}	12	4.86	257.58	16	36	0.00	1.91	0.85

mp-984050	{'Bi': 1.0, 'H': 3.0}	4	8.81	39.97	14	74	0.00	1.91	0.85
mp-982381	{'Na': 1.0, 'Cu': 3.0}	4	6.29	56.40	15	71	0.00	2.29	0.84
mp-19795	{'In': 4.0, 'S': 4.0}	8	4.77	204.47	15	20	1.55	2.13	0.84
mp-23251	{'K': 1.0, 'Br': 1.0}	2	2.62	75.29	7	22	4.52	2.37	0.84
mp-974332	{'S': 3.0, 'Br': 1.0}	4	2.77	105.42	9	24	0.00	2.14	0.84
mp-570122	{'Cr': 3.0, 'Te': 4.0}	7	6.23	177.71	16	30	0.00	2.20	0.84
mp-776896	{'Nb': 8.0, 'O': 20.0}	28	3.41	517.29	24	56	2.45	2.09	0.84
mp-572758	{'Re': 4.0, 'S': 8.0}	12	6.73	246.95	20	28	1.45	2.06	0.84
mp-22003	{'Na': 1.0, 'N': 3.0}	4	1.80	60.04	8	26	4.09	2.00	0.84
mp-27396	{'Ni': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	3.22	66.81	8	12	0.00	2.01	0.84
mp-1314	{'Li': 96.0, 'Si': 56.0}	152	1.55	2396.02	32	36	0.00	1.71	0.84
mp-827	{'K': 2.0, 'N': 6.0}	8	1.91	141.20	11	20	4.20	2.03	0.83
mp-11675	{'Nb': 3.0, 'Te': 6.0}	9	7.09	244.44	19	28	0.00	2.25	0.83
mp-980663	{'Yb': 4.0, 'Mg': 2.0}	6	5.94	206.97	11	20	0.00	1.88	0.83
mp-1002106	{'Hf': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	12.84	36.85	11	167	0.00	2.05	0.83
mp-9481	{'Tc': 4.0, 'S': 8.0}	12	4.25	253.46	18	26	1.18	2.15	0.83
mp-18712	{'Mg': 18.0, 'Pd': 6.0}	24	3.79	471.10	21	59	0.00	1.98	0.83
mp-15668	{'Na': 4.0, 'Se': 4.0}	8	3.25	208.65	12	21	0.49	2.03	0.83
mp-774873	{'Nb': 2.0, 'S': 4.0}	6	3.68	141.65	12	24	0.00	2.13	0.82
mp-571353	{'Ba': 1.0, 'Sn': 5.0}	6	6.52	186.21	15	36	0.00	2.28	0.82
mp-13134	{'Ga': 4.0, 'O': 6.0}	10	6.45	96.50	22	163	1.22	2.15	0.82
mp-977310	{'Os': 1.0, 'Au': 3.0}	4	18.95	68.44	21	145	0.00	2.35	0.82
mp-2273	{'Ag': 3.0, 'Sb': 1.0}	4	9.12	81.08	17	65	0.00	2.44	0.82
mp-2750	{'Cr': 8.0, 'Te': 12.0}	20	6.38	506.75	26	41	0.00	2.24	0.82
mp-1002122	{'Hf': 1.0, 'Ir': 1.0}	2	17.37	35.45	12	202	0.00	2.03	0.82
mp-973174	{'Na': 1.0, 'Ag': 3.0}	4	7.44	77.33	16	47	0.00	2.44	0.81
mp-975055	{'Rb': 3.0, 'Ac': 1.0}	4	2.80	286.80	7	6	0.00	2.07	0.81
mp-23262	{'Bi': 8.0, 'O': 12.0}	20	9.06	341.60	30	54	2.25	2.15	0.81
mp-10879	{'Ce': 1.0, 'Al': 1.0}	2	5.60	49.57	7	50	0.00	1.90	0.81
mp-2371	{'Ga': 2.0, 'Te': 5.0}	7	5.50	234.68	14	14	1.02	2.16	0.81
mp-571166	{'Ca': 2.0, 'Br': 4.0}	6	3.20	207.76	10	25	4.68	2.08	0.81
mp-1009220	{'Na': 1.0, 'H': 1.0}	2	1.54	25.81	5	13	1.50	1.81	0.81
mp-738	{'Sb': 8.0, 'Au': 4.0}	12	9.34	313.18	24	71	0.00	2.31	0.81
mvc-13960	{'Fe': 2.0, 'F': 8.0}	10	2.92	150.14	16	10	1.66	2.15	0.81
mp-975198	{'Rb': 1.0, 'Tl': 3.0}	4	8.31	139.67	14	14	0.00	2.35	0.81
mp-1094490	{'Mg': 3.0, 'Zn': 3.0}	6	4.09	109.35	12	52	0.00	2.04	0.80
mp-977189	{'Na': 3.0, 'Bi': 1.0}	4	4.04	114.36	9	19	0.19	2.01	0.80
mp-984719	{'Be': 1.0, 'Ag': 3.0}	4	8.69	63.56	16	100	0.00	2.32	0.80
mp-22888	{'Ca': 2.0, 'Br': 4.0}	6	3.23	205.72	10	21	4.74	2.08	0.80
mp-973446	{'K': 3.0, 'W': 1.0}	4	2.72	183.63	7	13	0.00	1.99	0.80
mp-571160	{'Tl': 4.0, 'Pt': 2.0}	6	14.24	140.86	20	65	0.00	2.27	0.80
mp-1025874	{'Mo': 3.0, 'S': 6.0}	9	2.80	284.87	12	18	1.51	2.12	0.80
mp-570354	{'Cu': 1.0, 'Br': 1.0}	2	6.17	38.62	11	28	0.30	2.45	0.80
mp-976412	{'Li': 3.0, 'Zn': 1.0}	4	2.16	66.29	7	20	0.00	1.79	0.80
mp-12105	{'Rb': 1.0, 'O': 2.0}	3	3.14	62.04	8	21	0.00	2.06	0.79
mp-864938	{'Mg': 6.0, 'Tl': 2.0}	8	4.92	187.28	13	36	0.00	1.96	0.79
mp-179	{'Y': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	4.93	52.03	7	46	0.00	2.00	0.79
mp-972692	{'Sn': 1.0, 'Pb': 1.0}	2	9.03	59.92	10	43	0.00	2.28	0.79
mp-2207	{'Nb': 2.0, 'Se': 4.0}	6	5.74	145.06	14	23	0.00	2.18	0.79
mp-11464	{'Mg': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	10.29	68.67	12	41	0.00	2.12	0.79
mp-30726	{'Y': 2.0, 'Hg': 6.0}	8	11.86	193.34	19	59	0.00	2.10	0.79

mp-29617	{'V': 6.0, 'Sb': 4.0}	10	7.31	180.05	20	99	0.00	2.19	0.79
mp-23237	{'Bi': 4.0, 'F': 12.0}	16	7.58	233.04	31	54	4.70	2.42	0.79
mp-985554	{'Ac': 6.0, 'Nd': 2.0}	8	8.01	341.98	14	28	0.00	2.02	0.79
mp-10159	{'K': 3.0, 'Sb': 1.0}	4	2.53	156.99	7	14	0.68	2.00	0.79
mp-1477	{'Ba': 8.0, 'Si': 16.0}	24	3.63	708.48	18	31	0.79	1.94	0.79
mp-974866	{'Rb': 3.0, 'Na': 1.0}	4	1.56	296.86	5	25	0.00	1.97	0.79
mp-570891	{'K': 1.0, 'Br': 1.0}	2	2.99	66.11	7	47	3.90	2.35	0.79
mp-867288	{'Tb': 2.0, 'Hg': 6.0}	8	13.03	193.86	19	57	0.00	2.07	0.78
mp-21185	{'Cd': 6.0, 'P': 4.0}	10	5.39	246.04	16	50	0.00	2.11	0.78
mp-865534	{'Y': 2.0, 'Br': 4.0}	6	4.21	196.31	11	9	0.00	2.06	0.78
mp-557993	{'Bi': 4.0, 'O': 8.0}	12	8.95	178.92	24	41	1.08	2.16	0.78
mp-204	{'Ce': 2.0, 'Fe': 4.0}	6	8.86	94.40	16	84	0.00	2.07	0.78
mp-12614	{'Ca': 8.0, 'Cu': 4.0}	12	2.63	362.99	12	25	0.00	1.98	0.78
mp-972002	{'Ac': 6.0, 'Yb': 2.0}	8	8.10	350.28	14	27	0.00	2.04	0.77
mp-985782	{'H': 8.0, 'C': 4.0}	12	1.03	90.85	10	18	6.43	1.72	0.77
mp-409	{'Na': 6.0, 'S': 6.0}	12	1.99	275.73	12	26	1.20	2.04	0.77
mp-985302	{'Ac': 6.0, 'Pr': 2.0}	8	7.94	343.57	14	29	0.00	2.05	0.77
mp-971951	{'Zr': 3.0, 'Pt': 1.0}	4	9.45	82.39	15	137	0.00	2.32	0.77
mp-30562	{'Sc': 4.0, 'Co': 2.0}	6	4.42	111.95	12	87	0.00	2.06	0.77
mp-866184	{'Ti': 6.0, 'Pb': 2.0}	8	7.80	149.41	18	107	0.00	2.19	0.76
mp-22919	{'Ag': 1.0, 'I': 1.0}	2	6.64	58.69	11	32	1.01	2.60	0.76
mp-8177	{'Hg': 1.0, 'F': 2.0}	3	8.77	45.16	15	88	1.17	2.45	0.76
mp-18167	{'Ca': 12.0, 'Cd': 8.0}	20	3.62	633.04	15	29	0.00	1.85	0.76
mp-11687	{'V': 3.0, 'Te': 6.0}	9	6.65	229.45	17	26	0.00	2.19	0.76
mp-21318	{'Pt': 2.0, 'Pb': 4.0}	6	13.77	147.03	16	72	0.00	2.02	0.76
mp-30784	{'Mg': 6.0, 'Zn': 33.0}	39	6.12	625.14	33	67	0.00	2.11	0.75
mp-570657	{'Mg': 4.0, 'Si': 2.0}	6	2.06	123.42	8	44	0.00	1.88	0.75
mp-691	{'Sn': 4.0, 'Se': 4.0}	8	5.83	225.05	15	24	1.33	2.19	0.75
mp-22865	{'Cs': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	3.75	74.57	8	15	5.48	2.49	0.75
mp-31502	{'Sc': 2.0, 'Cd': 14.0}	16	7.71	358.19	20	53	0.00	1.96	0.75
mp-973402	{'Sb': 1.0, 'Pd': 3.0}	4	10.93	67.03	16	148	0.00	2.30	0.75
mp-22891	{'Bi': 4.0, 'O': 6.0}	10	8.86	174.58	21	110	0.00	2.21	0.75
mp-31326	{'Mg': 6.0, 'In': 3.0}	9	3.87	210.20	12	40	0.00	1.95	0.75
mp-11577	{'Yb': 1.0, 'Zn': 1.0}	2	7.03	56.35	7	24	0.00	1.91	0.75
mp-979955	{'Yb': 3.0, 'Mn': 1.0}	4	7.95	119.84	10	17	0.00	1.92	0.75
mp-510430	{'Li': 26.0, 'In': 6.0}	32	2.47	584.21	17	23	0.00	1.74	0.74
mp-1573	{'Sn': 16.0, 'Pd': 8.0}	24	8.45	540.53	30	80	0.00	2.26	0.74
mp-984744	{'Ca': 6.0, 'Tl': 2.0}	8	4.03	267.41	11	14	0.00	1.97	0.74
mp-445	{'Nd': 2.0, 'Co': 4.0}	6	9.04	96.26	16	119	0.00	2.12	0.74
mp-1039383	{'Ca': 2.0, 'Mg': 6.0}	8	1.74	216.05	8	25	0.00	1.87	0.74
mp-22864	{'Bi': 8.0, 'Pt': 4.0}	12	12.76	319.06	23	82	0.00	2.19	0.74
mp-8262	{'K': 4.0, 'P': 6.0}	10	1.91	296.78	11	9	0.95	2.13	0.74
mp-1115	{'Pt': 1.0, 'Se': 2.0}	3	7.82	74.95	11	18	0.67	2.21	0.74
mp-579718	{'Th': 2.0, 'Cu': 1.0}	3	11.27	77.75	11	46	0.00	2.07	0.74
mp-28978	{'Ba': 4.0, 'S': 6.0}	10	4.11	299.96	13	32	1.62	2.06	0.74
mp-38970	{'Ga': 4.0, 'Te': 6.0}	10	5.23	331.84	15	22	1.01	2.17	0.73
mp-23208	{'U': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	5.49	208.27	14	25	0.00	2.12	0.73
mp-975390	{'Rb': 1.0, 'Ca': 3.0}	4	1.72	198.68	5	10	0.00	1.84	0.73
mp-27971	{'Ac': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	4.66	237.72	14	28	5.11	2.25	0.73
mp-8781	{'Sn': 2.0, 'S': 2.0}	4	2.57	194.71	7	12	1.53	2.13	0.73
mp-998949	{'Ti': 2.0, 'Pt': 2.0}	4	12.76	63.23	15	192	0.00	2.14	0.73

mp-13270	{'Ca': 2.0, 'Ag': 4.0}	6	5.92	143.42	15	48	0.00	2.37	0.73
mp-30362	{'Zr': 3.0, 'Ag': 1.0}	4	7.35	86.15	14	92	0.00	2.41	0.72
mp-8377	{'Te': 4.0, 'O': 8.0}	12	5.27	200.97	19	25	2.98	2.17	0.72
mp-21273	{'Fe': 2.0, 'Te': 2.0}	4	7.00	87.08	12	20	0.00	2.18	0.72
mp-23263	{'La': 2.0, 'Br': 6.0}	8	4.87	258.10	13	26	2.93	2.16	0.72
mp-30722	{'Sc': 2.0, 'Hg': 6.0}	8	12.02	178.73	20	64	0.00	2.24	0.72
mp-13868	{'Pd': 2.0, 'F': 8.0}	10	4.47	135.42	17	35	0.79	2.17	0.72
mp-640041	{'Nb': 2.0, 'Zn': 32.0}	34	7.30	518.69	33	85	0.00	2.15	0.72
mp-867248	{'La': 1.0, 'Bi': 3.0}	4	10.02	126.97	12	52	0.00	2.16	0.72
mp-7440	{'Na': 8.0, 'P': 8.0}	16	2.05	349.27	13	28	0.89	2.00	0.72
mp-1017539	{'Zn': 2.0, 'O': 2.0}	4	5.51	49.08	11	46	0.45	2.01	0.71
mp-571033	{'Ni': 2.0, 'Se': 2.0}	4	6.30	72.52	8	22	0.00	1.59	0.71
mp-1394	{'Rb': 2.0, 'O': 1.0}	3	3.82	81.32	8	23	1.32	2.17	0.71
mp-700	{'Ge': 4.0, 'Se': 4.0}	8	5.12	196.60	14	21	0.90	2.15	0.71
mp-557523	{'V': 2.0, 'S': 4.0}	6	1.90	201.04	8	11	0.00	2.10	0.71
mp-1902	{'Mn': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	8.76	30.57	10	138	0.00	2.19	0.71
mp-1371	{'Sn': 12.0, 'Pd': 4.0}	16	8.10	379.07	25	64	0.00	2.34	0.71
mp-9921	{'Zr': 2.0, 'S': 6.0}	8	3.38	184.29	11	21	1.09	1.99	0.71
mp-29551	{'Na': 3.0, 'Hg': 1.0}	4	3.84	116.45	8	22	0.00	2.01	0.70
mp-979263	{'Th': 2.0, 'Mg': 6.0}	8	4.87	208.17	11	49	0.00	1.88	0.70
mp-22882	{'Yb': 2.0, 'Br': 4.0}	6	5.48	201.55	11	20	4.88	2.08	0.70
mp-1038724	{'Ca': 4.0, 'Mg': 2.0}	6	1.60	217.27	6	20	0.00	1.83	0.70
mp-1039262	{'Ca': 2.0, 'Zn': 6.0}	8	4.82	162.97	13	38	0.00	2.05	0.70
mp-27678	{'Y': 4.0, 'Cl': 6.0}	10	3.43	274.92	12	16	0.86	2.02	0.70
mp-21328	{'Hf': 4.0, 'Sn': 4.0}	8	10.84	182.09	16	102	0.00	2.01	0.70
mp-973940	{'Li': 1.0, 'Cd': 3.0}	4	6.96	82.07	10	35	0.00	1.94	0.70
mp-982637	{'Na': 3.0, 'Mg': 1.0}	4	1.21	127.77	5	10	0.00	1.91	0.70
mp-554799	{'V': 2.0, 'F': 8.0}	10	2.95	142.77	14	14	2.31	2.10	0.70
mp-23221	{'Pr': 2.0, 'Br': 6.0}	8	5.03	251.18	13	26	3.43	2.17	0.69
mp-20729	{'La': 1.0, 'In': 3.0}	4	7.28	110.20	11	179	0.00	2.18	0.69
mp-2800	{'U': 1.0, 'Si': 3.0}	4	8.23	65.00	10	117	0.00	1.80	0.69
mp-1100	{'Yb': 1.0, 'C': 2.0}	3	6.99	46.79	8	64	1.24	1.73	0.69
mp-30719	{'Mg': 8.0, 'Hg': 4.0}	12	6.37	260.00	16	45	0.00	1.99	0.69
mp-680671	{'Mg': 20.0, 'Zn': 35.0}	55	4.90	940.03	32	61	0.00	2.06	0.69
mp-568170	{'Tb': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	4.48	196.80	13	25	4.29	2.16	0.69
mp-13682	{'Pd': 4.0, 'S': 8.0}	12	4.28	264.89	17	22	0.65	2.26	0.69
mp-9548	{'Ge': 6.0, 'As': 6.0}	12	4.81	305.48	15	20	0.64	2.06	0.68
mp-22875	{'Tl': 1.0, 'Br': 1.0}	2	7.07	66.78	9	28	2.36	2.42	0.68
mp-27838	{'Na': 6.0, 'Bi': 2.0}	8	3.63	254.30	10	17	0.00	1.96	0.68
mp-9920	{'Ti': 2.0, 'S': 6.0}	8	2.94	162.68	11	19	0.23	2.06	0.68
mp-7897	{'K': 6.0, 'P': 2.0}	8	1.70	289.49	8	17	0.21	2.06	0.68
mp-11342	{'Ga': 2.0, 'Se': 2.0}	4	4.41	111.87	9	14	1.36	2.12	0.68
mp-23210	{'Mg': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	2.06	76.93	6	10	5.67	2.06	0.67
mp-1008653	{'Ag': 1.0, 'C': 1.0}	2	7.83	25.43	11	107	0.00	2.38	0.67
mp-23231	{'Ag': 1.0, 'Br': 1.0}	2	6.22	50.09	10	40	0.79	2.57	0.67
mp-11472	{'Sr': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	8.94	90.76	10	20	0.00	2.17	0.67
mp-867227	{'Li': 3.0, 'Pt': 1.0}	4	6.37	56.26	9	48	0.00	1.76	0.67
mp-986716	{'Sr': 24.0, 'N': 16.0}	40	4.10	942.40	22	51	0.35	1.94	0.67
mp-982195	{'K': 1.0, 'Nd': 3.0}	4	5.00	156.65	7	22	0.00	1.84	0.66
mp-28753	{'Nd': 1.0, 'I': 2.0}	3	5.59	118.24	8	11	0.00	2.15	0.66
mp-979956	{'Yb': 3.0, 'Mg': 1.0}	4	6.35	142.15	8	18	0.00	1.88	0.66

mp-570259	{'Mg': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	2.10	75.11	6	10	5.57	2.06	0.66
mp-971718	{'Zn': 1.0, 'Bi': 3.0}	4	9.90	116.15	11	50	0.00	2.09	0.66
mp-1004377	{'Hf': 1.0, 'B': 6.0}	7	6.15	65.75	11	163	0.00	1.59	0.66
mp-1977	{'Nd': 1.0, 'Sn': 3.0}	4	7.59	109.44	11	56	0.00	2.21	0.66
mp-2776	{'Ga': 2.0, 'Au': 1.0}	3	9.25	60.37	12	73	0.00	2.33	0.66
mp-22898	{'K': 1.0, 'I': 1.0}	2	2.97	92.74	6	10	4.04	2.38	0.66
mp-27145	{'Ca': 20.0, 'Bi': 12.0}	32	5.16	1065.42	21	32	0.00	2.02	0.66
mp-27972	{'Ac': 2.0, 'Br': 6.0}	8	5.57	278.26	13	24	4.11	2.21	0.66
mp-8943	{'Pt': 2.0, 'F': 8.0}	10	6.56	137.24	18	39	1.29	2.16	0.65
mp-982773	{'Na': 3.0, 'Tl': 1.0}	4	3.69	123.07	8	2	0.00	2.01	0.65
mp-500	{'Ta': 2.0, 'Se': 4.0}	6	7.86	143.24	13	22	0.00	2.11	0.65
mp-581833	{'Rb': 1.0, 'N': 3.0}	4	2.47	85.66	7	17	3.80	2.00	0.65
mp-1851	{'Sn': 4.0, 'Pd': 8.0}	12	10.58	208.08	23	133	0.00	2.28	0.65
mp-1039198	{'Mg': 3.0, 'Bi': 1.0}	4	4.65	100.62	8	41	0.00	1.96	0.65
mp-30469	{'Tl': 1.0, 'Bi': 2.0}	3	10.60	97.48	11	41	0.00	2.30	0.65
mp-9922	{'Hf': 2.0, 'S': 6.0}	8	5.09	179.16	12	18	1.14	2.00	0.64
mp-1039292	{'Ca': 6.0, 'Zn': 2.0}	8	2.40	256.59	8	25	0.00	1.91	0.64
mp-978993	{'Th': 3.0, 'S': 1.0}	4	11.16	108.36	10	61	0.00	1.90	0.64
mp-22060	{'Nb': 6.0, 'In': 2.0}	8	8.58	152.27	16	153	0.00	2.16	0.64
mp-555293	{'Nb': 1.0, 'S': 2.0}	3	1.21	215.89	4	7	0.00	2.13	0.63
mp-706	{'Hg': 2.0, 'F': 2.0}	4	8.97	81.30	15	39	1.98	2.51	0.63
mp-570775	{'Ba': 4.0, 'Au': 4.0}	8	7.98	278.39	13	32	0.00	2.07	0.63
mp-571270	{'Nb': 4.0, 'Se': 8.0}	12	6.02	276.85	17	24	0.00	2.19	0.63
mp-977140	{'Na': 1.0, 'Ta': 3.0}	4	12.56	74.78	12	124	0.00	2.00	0.63
mp-2233	{'Th': 4.0, 'Ag': 2.0}	6	11.18	169.88	13	74	0.00	2.05	0.63
mp-973528	{'K': 3.0, 'Si': 1.0}	4	1.55	155.90	5	13	0.00	1.96	0.63
mp-22878	{'Mn': 2.0, 'Bi': 2.0}	4	8.60	101.93	10	41	0.00	2.02	0.63
mp-14018	{'K': 6.0, 'As': 2.0}	8	2.07	309.07	8	14	0.11	2.05	0.63
mp-602	{'Te': 4.0, 'Mo': 2.0}	6	6.93	168.32	13	16	1.12	2.24	0.63
mp-973250	{'K': 1.0, 'La': 3.0}	4	4.66	162.52	7	22	0.00	1.94	0.63
mp-21140	{'Ce': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	7.76	56.03	7	40	0.00	2.04	0.63
mp-1321	{'Cd': 8.0, 'Sb': 8.0}	16	6.39	486.50	18	39	0.05	2.18	0.62
mp-20939	{'Pr': 1.0, 'Pb': 3.0}	4	10.37	122.14	10	49	0.00	2.00	0.62
mp-570686	{'Sn': 4.0, 'Bi': 4.0}	8	8.99	242.01	16	47	0.00	2.30	0.62
mp-34202	{'Bi': 2.0, 'Te': 3.0}	5	7.47	178.03	11	15	0.39	2.18	0.62
mp-443	{'Ca': 2.0, 'Au': 4.0}	6	10.37	138.94	14	67	0.00	2.15	0.62
mp-556742	{'Ga': 4.0, 'S': 4.0}	8	3.42	197.88	11	17	2.02	2.14	0.62
mp-30491	{'Mg': 2.0, 'Cd': 6.0}	8	6.80	176.48	12	45	0.00	1.92	0.62
mp-974270	{'Na': 3.0, 'Al': 1.0}	4	1.41	112.63	5	17	0.00	1.93	0.62
mp-22795	{'Pb': 4.0, 'Au': 2.0}	6	12.49	162.60	13	57	0.00	2.00	0.62
mp-997569	{'Al': 4.0, 'P': 4.0}	8	0.53	728.54	4	8	2.16	2.01	0.61
mp-22877	{'V': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	2.87	70.42	7	10	1.26	2.19	0.61
mp-977062	{'Na': 3.0, 'Ca': 1.0}	4	1.19	151.92	4	9	0.00	1.78	0.61
mp-29621	{'Ba': 10.0, 'Bi': 6.0}	16	5.92	737.33	14	23	0.00	1.99	0.61
mp-1755	{'Zn': 4.0, 'Au': 12.0}	16	15.74	276.96	29	125	0.00	2.30	0.60
mp-976806	{'Ni': 2.0, 'Au': 6.0}	8	16.53	130.53	22	146	0.00	2.31	0.60
mp-23195	{'Bi': 8.0, 'O': 12.0}	20	8.29	373.43	24	21	1.67	2.16	0.60
mp-985287	{'Ag': 2.0, 'Au': 6.0}	8	16.05	144.56	23	122	0.00	2.43	0.60
mp-12283	{'Li': 5.0, 'Tl': 2.0}	7	5.53	133.07	10	24	0.00	1.81	0.60
mp-1481	{'Sn': 1.0, 'Te': 1.0}	2	6.87	59.53	8	43	0.00	2.37	0.60
mp-568823	{'Yb': 2.0, 'Au': 6.0}	8	16.06	157.96	19	83	0.00	2.18	0.59

mp-23302	{'Rb': 1.0, 'I': 1.0}	2	3.90	90.37	6	31	3.97	2.37	0.59
mp-1852	{'U': 1.0, 'F': 5.0}	6	5.15	107.34	11	15	0.75	2.06	0.59
mp-866006	{'Ca': 1.0, 'Bi': 3.0}	4	8.88	124.77	10	45	0.00	2.14	0.59
mp-555037	{'Ta': 1.0, 'S': 2.0}	3	6.10	66.75	8	22	0.00	2.06	0.59
mp-1264	{'Cd': 1.0, 'Au': 3.0}	4	15.59	74.93	15	117	0.00	2.30	0.59
mp-17659	{'Mg': 23.0, 'Al': 30.0}	53	2.22	1023.46	19	56	0.00	1.90	0.59
mp-862732	{'Pm': 2.0, 'Zn': 6.0}	8	7.09	159.78	13	64	0.00	2.04	0.59
mp-22867	{'Rb': 1.0, 'Br': 1.0}	2	3.16	86.78	6	14	4.37	2.45	0.58
mp-2786	{'Ca': 10.0, 'Zn': 6.0}	16	2.76	476.65	11	27	0.00	1.92	0.58
mp-2079	{'Rb': 4.0, 'P': 6.0}	10	2.64	331.43	10	17	1.07	2.14	0.58
mp-2484	{'Sm': 1.0, 'Sn': 3.0}	4	7.81	107.68	10	57	0.00	2.17	0.58
mp-864758	{'Na': 3.0, 'In': 1.0}	4	2.54	120.23	6	24	0.00	2.00	0.58
mp-30371	{'Cd': 10.0, 'Au': 6.0}	16	11.57	330.82	22	73	0.00	2.14	0.58
mp-673245	{'Cu': 4.0, 'I': 4.0}	8	5.67	222.99	15	38	1.15	2.48	0.58
mp-27637	{'Ni': 1.0, 'Br': 2.0}	3	4.97	72.97	7	17	0.48	2.01	0.57
mp-1720	{'Sm': 2.0, 'Ru': 4.0}	6	10.53	111.21	14	152	0.00	2.15	0.57
mp-505071	{'Si': 8.0, 'Pd': 36.0}	44	10.19	660.76	37	163	0.00	2.22	0.57
mp-7007	{'Nb': 1.0, 'Se': 2.0}	3	3.21	129.72	6	10	0.00	2.19	0.57
mp-2327	{'Ti': 2.0, 'Zn': 32.0}	34	7.01	518.17	28	79	0.00	2.16	0.57
mp-568560	{'Tl': 1.0, 'Br': 1.0}	2	6.06	77.95	7	18	2.35	2.35	0.57
mp-23229	{'Fe': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	2.93	71.76	7	11	0.68	2.27	0.57
mp-974330	{'S': 1.0, 'Br': 3.0}	4	3.69	122.44	7	10	0.00	2.04	0.56
mp-977207	{'Li': 4.0, 'Mg': 2.0}	6	1.02	124.60	5	21	0.00	1.82	0.56
mp-573697	{'Cs': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	3.18	88.05	6	12	5.02	2.49	0.56
mp-1039385	{'Ca': 5.0, 'Mg': 1.0}	6	1.58	236.40	5	17	0.00	1.81	0.56
mp-11872	{'Ag': 4.0, 'O': 6.0}	10	6.58	133.17	20	76	0.00	2.48	0.56
mp-501	{'Ta': 4.0, 'Se': 8.0}	12	7.84	287.08	16	23	0.00	2.10	0.56
mp-979936	{'Rb': 1.0, 'Yb': 3.0}	4	5.03	199.52	6	9	0.00	1.83	0.56
mp-979935	{'Rb': 1.0, 'Yb': 3.0}	4	5.00	200.91	6	12	0.00	1.85	0.56
mp-978282	{'Mg': 3.0, 'Hg': 1.0}	4	5.29	85.80	8	22	0.00	1.98	0.56
mp-12724	{'Sr': 4.0, 'Zn': 4.0}	8	3.98	255.45	9	24	0.00	1.97	0.56
mp-11288	{'Ca': 6.0, 'Hg': 4.0}	10	5.58	310.27	11	30	0.00	1.95	0.56
mp-31144	{'Rb': 3.0, 'Au': 7.0}	10	9.43	287.93	16	54	0.00	2.23	0.55
mp-30760	{'Li': 3.0, 'Pb': 1.0}	4	5.06	74.88	7	23	0.00	1.77	0.55
mp-995181	{'Sn': 1.0, 'Ge': 1.0}	2	1.53	207.55	3	5	0.61	2.11	0.55
mp-867303	{'Ag': 1.0, 'Au': 3.0}	4	16.00	72.52	16	126	0.00	2.44	0.55
mp-31172	{'Ca': 10.0, 'Ag': 6.0}	16	3.62	480.76	13	30	0.00	2.09	0.55
mp-2642	{'Cd': 1.0, 'Ag': 1.0}	2	9.35	39.12	9	80	0.00	2.33	0.55
mp-743	{'Rb': 2.0, 'N': 6.0}	8	2.63	160.74	9	17	4.20	2.02	0.55
mp-569850	{'Ce': 2.0, 'Br': 6.0}	8	5.00	252.17	11	22	0.01	2.16	0.55
mp-30418	{'Sn': 1.0, 'Au': 5.0}	6	16.00	114.52	18	114	0.00	2.37	0.55
mp-1028698	{'W': 4.0, 'Se': 8.0}	12	5.90	384.78	13	18	1.68	2.06	0.54
mp-972353	{'U': 3.0, 'Pa': 1.0}	4	18.35	85.54	11	152	0.00	1.89	0.54
mp-2136	{'Sb': 8.0, 'O': 12.0}	20	5.36	361.53	20	19	2.23	2.21	0.54
mp-2507	{'Ga': 4.0, 'S': 4.0}	8	3.41	198.51	10	16	2.01	2.14	0.54
mp-982981	{'Na': 6.0, 'Rh': 2.0}	8	3.13	182.56	9	15	0.00	2.00	0.54
mp-817	{'Tm': 1.0, 'Tl': 3.0}	4	12.05	107.78	11	46	0.00	2.17	0.54
mp-12699	{'Ca': 6.0, 'Au': 8.0}	14	9.00	335.10	17	51	0.00	2.09	0.53
mp-693	{'Pr': 3.0, 'Tl': 1.0}	4	8.13	128.05	9	40	0.00	2.13	0.53
mp-978798	{'Sm': 3.0, 'I': 1.0}	4	7.48	128.34	8	30	0.00	2.00	0.53
mp-2667	{'Cs': 1.0, 'Au': 1.0}	2	6.51	84.09	6	10	1.99	2.16	0.53

mp-23194	{'La': 1.0, 'I': 2.0}	3	5.58	116.78	7	11	0.00	2.18	0.53
mp-567244	{'Mg': 6.0, 'Tl': 3.0}	9	5.82	216.67	11	34	0.00	1.96	0.53
mp-571264	{'Ca': 10.0, 'Au': 8.0}	18	6.76	485.32	16	42	0.00	2.02	0.53
mp-7667	{'K': 4.0, 'S': 6.0}	10	2.03	284.99	9	12	1.32	2.15	0.53
mp-583266	{'Mg': 6.0, 'Zn': 6.0}	12	4.07	219.38	12	52	0.00	2.00	0.53
mp-643063	{'Nb': 4.0, 'Se': 8.0}	12	6.01	277.14	15	23	0.00	2.19	0.53
mp-21296	{'Pt': 2.0, 'Pb': 8.0}	10	11.97	284.12	14	45	0.00	1.96	0.53
mp-976765	{'Na': 3.0, 'Au': 1.0}	4	4.42	99.94	7	25	0.00	1.99	0.52
mp-862373	{'Sc': 2.0, 'S': 4.0}	6	2.61	138.58	7	64	0.00	1.97	0.52
mp-578	{'Ga': 3.0, 'Ag': 6.0}	9	9.02	157.61	19	71	0.00	2.48	0.52
mp-30366	{'Ca': 12.0, 'Au': 4.0}	16	3.96	531.48	11	26	0.00	1.89	0.52
mp-977200	{'Na': 3.0, 'C': 1.0}	4	1.82	74.02	5	32	0.00	1.85	0.52
mp-20320	{'In': 4.0, 'Te': 4.0}	8	5.99	268.95	12	20	0.01	2.27	0.52
mp-23255	{'U': 2.0, 'Br': 6.0}	8	6.42	247.08	11	31	0.00	2.10	0.52
mp-1038879	{'Ca': 3.0, 'Zn': 1.0}	4	2.35	131.06	5	30	0.00	1.92	0.51
mp-27507	{'Sc': 2.0, 'Cl': 2.0}	4	2.55	104.84	6	14	0.00	2.06	0.51
mp-30435	{'Ba': 2.0, 'Zn': 4.0}	6	5.50	161.77	9	27	0.00	2.03	0.51
mp-30066	{'Sb': 7.0, 'Pd': 20.0}	27	10.76	460.10	28	140	0.00	2.26	0.51
mp-22851	{'Na': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	2.26	42.96	5	26	4.45	2.27	0.51
mp-258	{'Zr': 2.0, 'V': 4.0}	6	6.43	99.69	12	140	0.00	2.25	0.51
mp-975253	{'Rb': 1.0, 'Pr': 3.0}	4	5.17	163.07	7	22	0.00	2.11	0.51
mp-1006226	{'Zn': 8.0, 'Bi': 8.0}	16	8.03	453.77	16	38	0.00	2.08	0.50
mp-23227	{'Cu': 2.0, 'Br': 2.0}	4	4.87	97.92	10	29	0.43	2.50	0.50
mp-1658	{'Tl': 16.0, 'O': 24.0}	40	9.70	625.36	32	109	0.03	2.23	0.50
mp-11260	{'Ti': 3.0, 'Au': 1.0}	4	8.35	67.69	11	90	0.00	2.28	0.50
mp-1608	{'Zr': 1.0, 'Hg': 3.0}	4	12.98	88.69	12	82	0.00	2.28	0.50
mp-976408	{'Li': 3.0, 'Ag': 1.0}	4	3.11	68.77	6	17	0.00	1.86	0.49
mp-971909	{'Zn': 2.0, 'Pd': 6.0}	8	10.54	121.26	16	151	0.00	2.24	0.49
mp-11555	{'Pu': 1.0, 'Ru': 1.0}	2	16.36	35.03	9	175	0.00	2.14	0.49
mp-568018	{'Rb': 2.0, 'Sb': 4.0}	6	4.29	254.55	8	15	0.31	2.16	0.49
mp-862769	{'Rb': 2.0, 'Ge': 6.0}	8	4.17	241.86	10	4	0.00	2.13	0.49
mp-30364	{'Ba': 1.0, 'Au': 5.0}	6	13.40	139.04	14	76	0.00	2.26	0.49
mp-569054	{'La': 4.0, 'Co': 6.0}	10	7.87	191.83	14	75	0.00	2.12	0.49
mp-569581	{'Bi': 2.0, 'Pt': 1.0}	3	12.11	84.04	9	31	0.00	2.17	0.49
mp-1011695	{'Cs': 2.0, 'Se': 1.0}	3	3.72	153.89	5	12	1.84	2.07	0.49
mp-1814	{'Ba': 1.0, 'Ag': 5.0}	6	7.89	142.41	13	50	0.00	2.43	0.48
mp-604908	{'Co': 2.0, 'Se': 2.0}	4	5.99	76.43	10	16	0.00	2.34	0.48
mp-7926	{'Ta': 4.0, 'Se': 8.0}	12	7.55	298.25	14	23	0.00	2.10	0.48
mp-20601	{'Nd': 1.0, 'Pb': 3.0}	4	10.55	120.52	8	47	0.00	1.92	0.48
mp-20566	{'Mg': 1.0, 'In': 3.0}	4	6.02	101.70	8	40	0.00	2.14	0.48
mp-30355	{'Sr': 8.0, 'Ag': 8.0}	16	5.02	517.80	14	28	0.00	2.21	0.47
mp-978499	{'Si': 1.0, 'As': 3.0}	4	5.47	76.78	8	68	0.00	2.11	0.47
mp-973767	{'Pm': 1.0, 'Bi': 3.0}	4	10.33	124.14	9	54	0.00	2.12	0.47
mp-27743	{'Bi': 1.0, 'F': 5.0}	6	4.85	104.15	11	15	1.90	2.30	0.47
mp-570896	{'Tl': 4.0, 'Pd': 2.0}	6	12.24	139.78	14	54	0.00	2.33	0.47
mp-16886	{'Cd': 9.0, 'Au': 9.0}	18	13.09	353.23	22	92	0.00	2.19	0.47
mp-27440	{'Zr': 2.0, 'Cl': 2.0}	4	4.13	101.82	7	19	0.00	2.13	0.47
mp-985283	{'Ag': 3.0, 'Ge': 1.0}	4	9.02	72.98	12	72	0.00	2.45	0.47
mp-32811	{'Ag': 4.0, 'Te': 2.0}	6	7.75	147.20	13	39	0.00	2.47	0.47
mp-984523	{'Cs': 1.0, 'Ca': 3.0}	4	2.05	205.20	4	4	0.00	1.84	0.47
mp-646824	{'Ca': 6.0, 'Ag': 16.0}	22	6.46	505.62	21	50	0.00	2.39	0.47

mp-947	{'Au': 4.0, 'S': 2.0}	6	9.25	152.88	12	64	1.91	2.29	0.46
mp-484	{'Te': 6.0, 'As': 4.0}	10	5.74	308.06	11	16	0.58	2.09	0.46
mp-571133	{'Nb': 4.0, 'Se': 8.0}	12	5.59	298.16	13	22	0.00	2.17	0.46
mp-569679	{'Zn': 2.0, 'Se': 2.0}	4	4.68	102.43	7	11	1.97	2.07	0.46
mp-30651	{'Mg': 2.0, 'Ga': 4.0}	6	4.71	115.48	9	50	0.00	2.12	0.46
mp-985299	{'Ag': 3.0, 'N': 1.0}	4	8.96	62.59	12	104	0.00	2.43	0.46
mp-697111	{'H': 8.0, 'O': 4.0}	12	0.96	124.89	7	16	5.53	1.85	0.46
mp-11801	{'K': 6.0, 'N': 2.0}	8	1.16	374.76	5	7	0.00	2.01	0.46
mp-30408	{'Mg': 8.0, 'Au': 24.0}	32	14.27	572.72	31	111	0.00	2.28	0.46
mp-980021	{'Yb': 3.0, 'Os': 1.0}	4	12.86	91.58	9	48	0.00	1.95	0.45
mp-7898	{'Rb': 6.0, 'As': 2.0}	8	3.05	360.54	7	23	0.00	2.05	0.45
mp-568106	{'Mg': 41.0, 'Al': 67.0}	108	2.30	2023.09	23	56	0.00	1.94	0.45
mp-569639	{'Tl': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	5.72	69.67	6	20	2.60	2.35	0.45
mp-568171	{'Nd': 4.0, 'Al': 2.0}	6	5.76	181.98	7	35	0.00	1.80	0.45
mp-1021516	{'K': 2.0, 'Sn': 1.0}	3	2.02	161.58	4	1	0.00	2.02	0.45
mp-22216	{'In': 16.0, 'S': 24.0}	40	4.37	991.45	19	49	0.83	2.10	0.45
mp-20683	{'Cu': 6.0, 'Se': 4.0}	10	6.51	177.87	15	74	0.00	2.38	0.45
mp-1039208	{'Ca': 4.0, 'Zn': 2.0}	6	2.20	219.64	5	16	0.00	1.85	0.44
mp-1014	{'Zr': 4.0, 'Mn': 8.0}	12	7.68	173.82	15	157	0.00	2.12	0.44
mp-11266	{'Ba': 2.0, 'Cd': 4.0}	6	6.06	198.55	8	25	0.00	2.02	0.44
mp-971673	{'Bi': 4.0, 'S': 8.0}	12	6.02	301.23	12	23	1.19	2.07	0.44
mp-22903	{'Rb': 1.0, 'I': 1.0}	2	3.36	104.96	5	10	3.95	2.49	0.44
mp-567431	{'Th': 2.0, 'Cl': 8.0}	10	4.45	278.98	10	25	3.75	2.12	0.44
mp-12118	{'In': 2.0, 'Cu': 4.0}	6	8.71	92.26	13	92	0.00	2.34	0.44
mp-1629	{'Th': 4.0, 'Au': 2.0}	6	12.98	169.18	10	86	0.00	1.95	0.44
mp-974832	{'Rb': 3.0, 'Pb': 1.0}	4	3.59	214.23	5	7	0.00	1.99	0.44
mp-2098	{'Ce': 2.0, 'Os': 4.0}	6	15.55	111.21	13	198	0.00	2.12	0.44
mp-30034	{'Mg': 1.0, 'Br': 2.0}	3	3.33	91.83	5	15	4.46	2.07	0.44
mp-1008926	{'Cr': 1.0, 'Te': 1.0}	2	4.90	60.85	5	35	0.00	2.15	0.44
mp-1876	{'Sn': 1.0, 'S': 1.0}	2	5.00	50.10	5	80	0.95	2.09	0.44
mp-21405	{'In': 2.0, 'Se': 2.0}	4	5.39	119.39	7	11	1.08	2.11	0.43
mp-973415	{'Li': 2.0, 'La': 6.0}	8	5.48	256.90	8	25	0.00	1.89	0.43
mp-29862	{'Sn': 4.0, 'Br': 8.0}	12	4.29	430.82	11	6	2.56	2.18	0.43
mp-22922	{'Ag': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	5.36	44.43	7	43	1.20	2.52	0.43
mp-862871	{'Pb': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	4.44	208.16	8	29	3.37	2.22	0.43
mp-1009650	{'Rb': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	2.23	154.40	3	20	0.00	2.11	0.43
mp-488	{'Cu': 6.0, 'Se': 6.0}	12	5.80	244.81	15	65	0.00	2.40	0.43
mp-2418	{'Pd': 4.0, 'Se': 8.0}	12	5.94	295.76	14	23	0.01	2.32	0.43
mp-1572	{'Ga': 4.0, 'Se': 4.0}	8	4.39	224.86	9	14	1.26	2.12	0.43
mp-2089	{'Zr': 2.0, 'Te': 6.0}	8	6.43	244.83	10	21	0.00	2.13	0.43
mp-569895	{'Eu': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	4.09	209.66	9	22	0.00	2.15	0.43
mp-15622	{'Hf': 2.0, 'Se': 6.0}	8	6.66	207.12	10	16	0.61	2.05	0.43
mp-1943	{'Ga': 4.0, 'Se': 4.0}	8	4.41	224.04	9	13	1.25	2.12	0.42
mp-974452	{'Re': 3.0, 'C': 1.0}	4	17.35	54.61	10	301	0.00	1.87	0.42
mp-541837	{'Bi': 2.0, 'Se': 3.0}	5	7.06	154.11	8	12	0.54	2.07	0.42
mp-865171	{'Yb': 2.0, 'Hg': 6.0}	8	12.82	200.74	12	29	0.00	2.01	0.42
mp-972099	{'Yb': 2.0, 'Mg': 6.0}	8	3.78	216.03	7	25	0.00	1.85	0.42
mp-569683	{'In': 2.0, 'Au': 6.0}	8	15.32	153.03	16	108	0.00	2.29	0.42
mp-684580	{'Ag': 1.0, 'I': 1.0}	2	5.32	73.28	6	28	1.90	2.48	0.42
mp-998913	{'K': 1.0, 'O': 3.0}	4	1.85	78.21	5	14	0.89	2.06	0.42
mp-23304	{'Rb': 3.0, 'Bi': 1.0}	4	4.04	191.31	5	11	0.29	1.96	0.42

mp-8601	{'Te': 8.0, 'Mo': 6.0}	14	7.17	369.55	14	33	0.01	2.18	0.42
mp-1683	{'Zr': 2.0, 'Se': 6.0}	8	5.21	209.31	9	16	0.56	2.05	0.42
mp-571096	{'Fe': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	3.18	66.11	6	8	0.62	2.27	0.42
mp-20526	{'Pb': 2.0, 'S': 2.0}	4	3.86	205.83	5	7	2.26	2.00	0.41
mp-20826	{'Cu': 2.0, 'Te': 2.0}	4	6.90	92.05	9	15	0.00	2.33	0.41
mp-30892	{'Ba': 8.0, 'Bi': 6.0}	14	6.30	620.29	11	24	0.00	2.07	0.41
mp-28233	{'Mn': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	2.67	78.17	5	9	1.80	2.16	0.41
mp-1441	{'Cs': 1.0, 'O': 2.0}	3	3.73	73.37	5	18	0.00	1.99	0.41
mp-984699	{'Ba': 2.0, 'Sr': 6.0}	8	2.88	460.90	5	12	0.00	1.75	0.41
mp-976055	{'Li': 3.0, 'In': 1.0}	4	3.00	75.20	5	4	0.00	1.77	0.41
mp-976774	{'Ni': 1.0, 'Ge': 3.0}	4	7.07	64.98	7	108	0.00	1.88	0.41
mp-570935	{'Li': 2.0, 'I': 2.0}	4	3.32	134.04	5	15	4.38	1.98	0.40
mp-23202	{'In': 2.0, 'I': 2.0}	4	5.13	156.40	7	12	1.74	2.30	0.40
mp-567618	{'Si': 20.0, 'Pt': 48.0}	68	15.93	1034.78	38	205	0.00	2.10	0.40
mp-544	{'Ti': 6.0, 'Ir': 2.0}	8	8.83	126.26	13	169	0.00	2.24	0.40
mp-22887	{'Eu': 4.0, 'Cl': 8.0}	12	4.76	310.97	11	26	1.22	2.17	0.40
mp-20549	{'Ca': 1.0, 'Pb': 3.0}	4	8.99	122.22	7	60	0.00	1.99	0.40
mp-2665	{'Pr': 2.0, 'Ru': 4.0}	6	9.94	114.60	11	143	0.00	2.19	0.40
mp-672337	{'V': 2.0, 'Ge': 6.0}	8	6.74	132.52	11	85	0.00	2.15	0.40
mp-30428	{'Ba': 4.0, 'Cu': 4.0}	8	4.51	295.80	8	18	0.00	2.11	0.40
mp-571222	{'Cs': 1.0, 'Br': 1.0}	2	3.49	101.39	5	6	4.42	2.54	0.40
mp-976982	{'Li': 4.0, 'Mg': 2.0}	6	1.04	121.67	4	21	0.00	1.82	0.40
mp-2125	{'Te': 8.0, 'O': 16.0}	24	5.36	395.35	17	23	2.24	2.14	0.39
mp-499	{'Ag': 2.0, 'O': 2.0}	4	6.75	60.92	10	113	0.00	2.45	0.39
mp-29652	{'Ta': 4.0, 'Se': 12.0}	16	7.39	375.45	14	19	0.00	2.08	0.39
mp-974315	{'Ru': 2.0, 'I': 2.0}	4	7.25	104.49	9	61	0.00	2.44	0.39
mp-980049	{'Yb': 3.0, 'Re': 1.0}	4	12.30	95.23	8	35	0.00	1.96	0.39
mp-23163	{'Cs': 2.0, 'Bi': 4.0}	6	7.68	238.36	8	27	0.00	2.09	0.39
mp-985285	{'Co': 1.0, 'Hg': 3.0}	4	13.91	78.87	12	7	0.00	2.37	0.39
mp-984351	{'Cu': 2.0, 'Ag': 6.0}	8	9.69	132.67	15	91	0.00	2.46	0.38
mp-640095	{'La': 12.0, 'Co': 4.0}	16	6.82	463.37	12	35	0.00	2.01	0.38
mp-16366	{'Cu': 2.0, 'Se': 1.0}	3	7.01	48.83	8	86	0.00	2.34	0.38
mp-569916	{'Al': 6.0, 'Pt': 4.0}	10	9.52	164.43	12	127	0.00	2.00	0.38
mp-557266	{'Hg': 4.0, 'O': 8.0}	12	8.05	191.93	15	40	0.53	2.26	0.38
mp-570811	{'Pr': 2.0, 'Re': 4.0}	6	14.16	120.40	10	178	0.00	1.94	0.38
mp-27638	{'Ni': 1.0, 'I': 2.0}	3	5.58	92.92	6	14	0.00	2.22	0.38
mvc-11438	{'Co': 4.0, 'Se': 8.0}	12	6.18	233.10	14	37	0.00	2.36	0.38
mp-10736	{'Ba': 6.0, 'N': 2.0}	8	3.84	367.99	6	13	0.00	1.88	0.38
mp-978652	{'Si': 2.0, 'Hg': 6.0}	8	10.94	191.23	12	15	0.00	2.16	0.38
mp-7924	{'Li': 4.0, 'Sn': 10.0}	14	5.97	338.09	11	42	0.00	2.01	0.37
mp-22693	{'Te': 8.0, 'W': 4.0}	12	8.52	342.14	13	20	0.00	2.21	0.37
mp-22691	{'In': 2.0, 'Se': 2.0}	4	4.94	130.16	6	11	0.86	2.11	0.37
mp-510557	{'Cs': 2.0, 'N': 6.0}	8	3.18	182.81	7	15	4.26	1.99	0.37
mp-975043	{'Rb': 3.0, 'Ca': 1.0}	4	1.67	295.67	3	8	0.00	1.90	0.37
mp-977239	{'Li': 3.0, 'Th': 1.0}	4	4.60	91.35	5	26	0.00	1.78	0.37
mp-7459	{'Te': 8.0, 'Mo': 4.0}	12	6.76	344.84	12	20	0.00	2.22	0.37
mp-865875	{'Li': 3.0, 'Ag': 1.0}	4	3.18	67.27	5	32	0.00	1.88	0.37
mp-30357	{'Sr': 9.0, 'Ag': 6.0}	15	4.38	543.71	10	21	0.00	2.11	0.37
mp-570301	{'Ag': 2.0, 'Br': 2.0}	4	6.25	99.85	9	38	0.76	2.56	0.36
mp-11247	{'Li': 3.0, 'Au': 1.0}	4	5.77	62.67	6	42	0.00	1.85	0.36
mp-570229	{'Th': 2.0, 'Br': 8.0}	10	5.51	332.36	9	21	2.95	2.10	0.36

mp-569857	{'K': 8.0, 'P': 12.0}	20	1.91	594.27	9	17	1.09	2.13	0.36
mp-562100	{'Nb': 4.0, 'S': 12.0}	16	3.84	327.40	11	18	0.38	2.10	0.36
mp-862289	{'Ac': 2.0, 'Hg': 6.0}	8	11.96	230.12	11	44	0.00	2.14	0.36
mp-982261	{'Pb': 2.0, 'Se': 4.0}	6	7.26	167.12	8	8	0.00	2.05	0.35
mp-957	{'Hg': 1.0, 'Se': 1.0}	2	9.47	49.01	6	78	0.00	2.25	0.35
mp-571102	{'Tl': 1.0, 'I': 1.0}	2	6.05	90.93	5	12	2.44	2.38	0.35
mp-28336	{'Li': 12.0, 'P': 28.0}	40	1.98	796.13	12	24	1.79	1.97	0.35
mp-975994	{'Na': 1.0, 'La': 3.0}	4	5.03	145.22	5	25	0.00	1.97	0.35
mp-980945	{'Ti': 3.0, 'Nb': 1.0}	4	5.56	70.62	7	123	0.00	2.19	0.35
mp-9996	{'Si': 8.0, 'P': 16.0}	24	2.11	566.66	10	12	1.49	2.06	0.35
mp-1387	{'Al': 2.0, 'V': 6.0}	8	5.37	111.25	10	159	0.00	2.20	0.34
mp-862868	{'Pb': 2.0, 'Br': 4.0}	6	5.14	237.27	7	23	2.73	2.22	0.34
mp-15556	{'Rb': 4.0, 'As': 6.0}	10	3.52	373.60	8	10	0.64	2.21	0.34
mp-975404	{'Rb': 1.0, 'Ca': 3.0}	4	1.72	198.53	3	12	0.00	1.86	0.34
mp-504594	{'Zr': 2.0, 'Br': 2.0}	4	5.43	104.76	6	19	0.00	2.11	0.34
mp-23922	{'H': 16.0, 'N': 16.0}	32	1.34	298.41	10	25	4.18	1.84	0.34
mp-22870	{'In': 2.0, 'Br': 2.0}	4	4.74	136.51	6	13	1.62	2.26	0.34
mp-973166	{'Na': 2.0, 'Cd': 6.0}	8	6.25	191.27	8	17	0.00	1.97	0.34
mp-567744	{'Sr': 4.0, 'Br': 8.0}	12	3.76	437.56	8	17	4.47	2.11	0.33
mp-974827	{'K': 1.0, 'Pr': 3.0}	4	4.82	159.03	5	21	0.00	2.06	0.33
mp-568347	{'Nb': 4.0, 'Se': 8.0}	12	4.16	400.61	9	14	0.00	2.19	0.33
mp-974810	{'Rb': 3.0, 'Ru': 1.0}	4	3.21	184.65	4	38	0.00	1.99	0.33
mp-11820	{'Ba': 4.0, 'Na': 8.0}	12	2.22	549.00	5	8	0.00	1.74	0.33
mp-571664	{'Zr': 4.0, 'Rh': 2.0}	6	7.82	121.23	9	126	0.00	2.23	0.33
mp-977194	{'Na': 3.0, 'Be': 1.0}	4	1.25	103.24	3	14	0.00	1.84	0.32
mp-25469	{'Al': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	2.22	199.90	6	9	5.31	2.09	0.32
mp-972794	{'Si': 2.0, 'Sb': 6.0}	8	6.52	200.38	9	57	0.00	2.20	0.32
mp-753746	{'Rb': 2.0, 'O': 1.0}	3	3.23	96.21	4	5	0.48	2.04	0.32
mp-614603	{'Cs': 1.0, 'I': 1.0}	2	3.55	121.36	4	7	3.86	2.49	0.32
mp-1592	{'Ag': 8.0, 'Te': 4.0}	12	8.05	283.28	14	52	0.00	2.47	0.32
mp-1462	{'Sn': 16.0, 'Au': 8.0}	24	9.41	613.24	18	58	0.00	2.34	0.32
mp-22925	{'Ag': 1.0, 'I': 1.0}	2	5.32	73.22	5	20	1.72	2.48	0.32
mp-10762	{'Cd': 6.0, 'As': 4.0}	10	5.95	272.08	9	54	0.00	2.15	0.32
mp-1836	{'Tl': 4.0, 'Se': 4.0}	8	7.71	243.95	9	22	0.36	2.19	0.31
mp-977126	{'Li': 6.0, 'Ag': 2.0}	8	3.10	137.73	6	21	0.00	1.86	0.31
mp-867343	{'Li': 3.0, 'Cd': 1.0}	4	2.97	74.52	4	14	0.00	1.77	0.31
mp-974949	{'Rb': 3.0, 'Ir': 1.0}	4	5.14	144.88	5	16	0.18	2.05	0.31
mp-17524	{'Ge': 8.0, 'As': 16.0}	24	4.73	624.73	12	15	0.72	2.08	0.31
mp-1880	{'Sb': 2.0, 'F': 6.0}	8	4.23	140.22	8	15	4.54	2.15	0.31
mp-567395	{'Li': 30.0, 'Au': 8.0}	38	4.67	634.36	13	28	0.00	1.80	0.30
mp-580931	{'Mg': 4.0, 'Zn': 20.0}	24	5.95	392.28	14	62	0.00	2.11	0.30
mp-983509	{'Na': 6.0, 'Cd': 2.0}	8	2.46	244.75	5	12	0.00	1.93	0.30
mp-22460	{'Li': 2.0, 'In': 2.0}	4	4.92	82.11	5	40	0.00	1.94	0.30
mp-21765	{'Pd': 34.0, 'Se': 30.0}	64	7.94	1252.13	26	97	0.00	2.30	0.30
mp-22880	{'Fe': 1.0, 'Br': 2.0}	3	4.54	78.93	5	10	0.51	2.23	0.30
mp-472	{'U': 2.0, 'Al': 4.0}	6	8.43	115.06	7	83	0.00	1.91	0.29
mp-9063	{'Rb': 6.0, 'Se': 6.0}	12	3.35	489.34	7	13	0.92	2.13	0.29
mp-20485	{'In': 4.0, 'Se': 4.0}	8	5.08	253.46	7	10	0.46	2.11	0.29
mp-23205	{'Mg': 1.0, 'I': 2.0}	3	3.89	118.64	4	8	3.68	2.15	0.29
mp-8289	{'Sn': 2.0, 'F': 6.0}	8	3.42	170.42	7	47	2.92	2.23	0.28
mp-28116	{'Ti': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	2.68	73.53	4	6	0.00	2.18	0.28

mp-23305	{'Eu': 4.0, 'I': 8.0}	12	5.28	510.32	8	14	1.43	2.14	0.28
mp-1224	{'Hg': 4.0, 'O': 4.0}	8	9.85	146.07	10	24	1.25	2.17	0.28
mp-27456	{'Ba': 4.0, 'Br': 8.0}	12	4.59	430.36	8	21	4.37	2.18	0.28
mp-1393	{'Sn': 8.0, 'Au': 2.0}	10	8.45	264.10	11	51	0.00	2.39	0.28
mp-571636	{'In': 2.0, 'Cl': 2.0}	4	4.00	124.69	5	10	1.72	2.23	0.28
mp-567279	{'Zn': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	2.75	164.72	5	9	3.88	2.10	0.28
mp-23240	{'Co': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	3.29	65.44	5	7	0.09	2.39	0.28
mp-571555	{'In': 2.0, 'Cl': 2.0}	4	4.02	124.18	5	9	1.70	2.23	0.28
mp-779689	{'H': 12.0, 'N': 4.0}	16	0.74	152.05	5	8	3.75	1.75	0.27
mp-568536	{'Ba': 3.0, 'I': 6.0}	9	4.97	391.88	7	21	3.05	2.22	0.27
mp-567504	{'Cr': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	2.46	213.65	6	16	0.18	2.25	0.27
mp-972941	{'Na': 2.0, 'Bi': 6.0}	8	8.80	245.41	8	32	0.00	2.11	0.27
mp-1509	{'Sn': 8.0, 'S': 12.0}	20	4.36	508.63	11	17	0.86	2.23	0.27
mp-570687	{'Ag': 2.0, 'Cl': 2.0}	4	5.43	87.60	7	42	0.93	2.51	0.27
mp-22909	{'Zn': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	2.76	164.31	5	7	4.06	2.11	0.27
mp-11553	{'Tl': 3.0, 'Pt': 3.0}	6	13.06	152.34	9	514	0.00	2.24	0.27
mp-571122	{'Fe': 1.0, 'I': 2.0}	3	5.06	101.56	5	9	0.45	2.35	0.27
mp-28306	{'Mn': 1.0, 'Br': 2.0}	3	3.83	93.21	4	8	1.61	2.14	0.27
mp-570922	{'Mg': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	1.80	87.64	3	4	4.91	2.04	0.27
mp-979937	{'Yb': 3.0, 'Ru': 1.0}	4	10.90	94.49	6	40	0.00	1.97	0.27
mp-23188	{'In': 4.0, 'Bi': 2.0}	6	8.08	180.24	8	41	0.00	2.37	0.27
mp-11267	{'Ba': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	8.69	102.94	5	24	0.00	2.13	0.26
mp-754954	{'Ag': 8.0, 'Se': 4.0}	12	7.26	269.64	12	23	0.32	2.45	0.26
mp-570232	{'Tb': 4.0, 'Cl': 12.0}	16	3.52	500.58	8	14	4.65	2.12	0.26
mp-22894	{'Ag': 2.0, 'I': 2.0}	4	5.33	146.31	6	25	1.40	2.48	0.26
mp-999197	{'Ag': 2.0, 'N': 2.0}	4	8.12	49.85	8	156	0.00	2.37	0.26
mp-975321	{'Li': 2.0, 'Si': 6.0}	8	2.59	116.99	5	51	0.00	1.82	0.26
mp-568284	{'Sr': 4.0, 'I': 8.0}	12	4.24	534.50	7	13	3.80	2.15	0.26
mp-973533	{'Fe': 1.0, 'Ag': 3.0}	4	9.32	67.63	8	133	0.00	2.41	0.26
mp-36216	{'Ag': 4.0, 'S': 2.0}	6	6.47	127.23	9	24	1.13	2.55	0.26
mp-976424	{'Li': 1.0, 'La': 3.0}	4	5.25	133.91	4	25	0.00	1.87	0.26
mp-570017	{'Mg': 20.0, 'Au': 60.0}	80	14.27	1431.42	32	111	0.00	2.28	0.26
mp-27630	{'Cr': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	2.63	199.76	6	6	0.15	2.22	0.26
mp-361	{'Cu': 4.0, 'O': 2.0}	6	6.03	78.83	8	111	0.51	2.29	0.25
mp-11250	{'Mg': 72.0, 'Au': 36.0}	108	6.88	2133.26	23	58	0.00	1.99	0.25
mp-568936	{'Ag': 8.0, 'Se': 4.0}	12	7.98	245.40	12	58	0.00	2.44	0.25
mp-28013	{'Mn': 1.0, 'I': 2.0}	3	4.46	114.87	4	8	1.18	2.20	0.25
mp-22853	{'Mo': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	3.21	209.21	6	12	0.15	2.19	0.25
mp-980006	{'Yb': 3.0, 'Os': 1.0}	4	12.87	91.49	6	49	0.00	1.95	0.25
mp-569451	{'Sb': 12.0, 'Pd': 30.0}	42	10.56	731.47	21	128	0.00	2.26	0.25
mp-569960	{'Zn': 1.0, 'Br': 2.0}	3	4.05	92.36	4	8	3.31	2.18	0.25
mp-974641	{'K': 3.0, 'Tl': 1.0}	4	2.61	204.36	3	39	0.00	1.99	0.25
mp-2735	{'Pa': 1.0, 'O': 1.0}	2	13.63	30.10	5	193	0.00	1.99	0.24
mp-2284	{'Ag': 4.0, 'F': 8.0}	12	5.32	182.28	11	32	0.00	2.43	0.24
mp-974972	{'Rb': 3.0, 'Hf': 1.0}	4	3.07	235.05	3	23	0.00	1.96	0.24
mp-972077	{'Tc': 1.0, 'Ge': 3.0}	4	8.21	63.92	6	104	0.00	2.08	0.24
mp-1018153	{'Hf': 1.0, 'Au': 2.0}	3	16.86	56.39	7	166	0.00	2.22	0.24
mp-634	{'Hg': 3.0, 'S': 3.0}	6	6.97	166.40	7	8	1.72	2.27	0.24
mp-22881	{'Cd': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	3.61	84.30	4	8	3.59	2.26	0.24
mp-612740	{'In': 12.0, 'Se': 18.0}	30	5.04	922.63	11	19	0.99	2.10	0.24
mp-13548	{'Cs': 4.0, 'Pt': 2.0}	6	6.32	242.32	5	12	1.79	1.99	0.24

mp-30999	{'Cu': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	2.95	75.62	4	7	0.00	2.34	0.23
mp-2809	{'Sb': 8.0, 'S': 12.0}	20	4.28	527.42	9	16	1.31	2.13	0.23
mp-571279	{'Zr': 4.0, 'I': 8.0}	12	5.39	425.17	8	11	0.25	2.27	0.23
mp-680580	{'Zn': 96.0, 'As': 64.0}	160	5.42	3390.63	25	53	0.14	2.10	0.23
mp-995197	{'H': 8.0, 'C': 8.0}	16	1.16	148.83	5	10	3.65	1.72	0.23
mp-30031	{'Ca': 1.0, 'I': 2.0}	3	3.39	144.16	3	4	3.90	2.06	0.23
mp-1490	{'Al': 4.0, 'Au': 16.0}	20	15.42	351.10	16	127	0.00	2.27	0.23
mp-570506	{'Zr': 4.0, 'I': 8.0}	12	5.36	427.94	8	9	0.30	2.28	0.23
mp-570081	{'Cu': 2.0, 'I': 2.0}	4	5.69	111.21	6	9	1.65	2.48	0.23
mp-782035	{'Al': 12.0, 'O': 18.0}	30	3.63	279.73	11	16	5.00	1.91	0.23
mp-2793	{'Au': 2.0, 'Se': 2.0}	4	8.22	111.43	6	9	0.32	2.31	0.22
mp-10647	{'Tl': 1.0, 'Se': 1.0}	2	8.90	52.85	4	79	0.00	2.15	0.22
mp-32884	{'Ag': 4.0, 'S': 2.0}	6	6.38	129.09	8	26	1.31	2.54	0.22
mp-1018112	{'Y': 1.0, 'Sb': 2.0}	3	6.40	86.24	4	45	0.00	2.09	0.22
mp-973627	{'K': 3.0, 'Sr': 1.0}	4	1.23	275.87	2	2	0.00	1.91	0.22
mp-23291	{'Pb': 4.0, 'Cl': 8.0}	12	5.53	333.74	8	18	3.83	2.24	0.22
mp-556225	{'Ag': 4.0, 'S': 2.0}	6	6.50	126.54	8	23	1.10	2.54	0.22
mp-978846	{'Sn': 2.0, 'I': 4.0}	6	4.52	273.42	5	20	1.44	2.29	0.22
mp-9254	{'Al': 2.0, 'Te': 5.0}	7	4.46	257.81	5	6	1.13	2.08	0.22
mp-628773	{'Sn': 2.0, 'Se': 2.0}	4	4.78	137.24	4	12	0.51	2.10	0.22
mp-31053	{'Ag': 4.0, 'S': 2.0}	6	5.62	146.38	7	12	1.39	2.46	0.21
mp-643432	{'H': 12.0, 'N': 4.0}	16	1.00	113.21	5	8	4.46	1.76	0.21
mp-982246	{'Pb': 1.0, 'Au': 3.0}	4	15.70	84.43	7	84	0.00	2.22	0.21
mp-27726	{'S': 2.0, 'O': 4.0}	6	1.40	151.93	3	5	3.20	1.91	0.21
mp-30488	{'Cd': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	11.26	75.73	5	28	0.00	2.14	0.21
mp-1581	{'As': 8.0, 'O': 12.0}	20	3.47	378.97	8	10	3.63	2.03	0.21
mp-1168	{'Hf': 2.0, 'Te': 10.0}	12	6.13	442.20	7	12	0.00	2.12	0.21
mp-30033	{'Co': 1.0, 'Br': 2.0}	3	4.35	83.57	4	11	0.12	2.31	0.21
mp-510421	{'Cr': 2.0, 'O': 6.0}	8	2.40	138.48	5	9	2.31	2.11	0.21
mp-696114	{'Co': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	3.22	66.90	4	11	0.10	2.38	0.21
mp-542812	{'Ga': 6.0, 'Te': 6.0}	12	5.01	392.58	7	10	1.04	2.19	0.21
mp-1002230	{'Pu': 1.0, 'Bi': 1.0}	2	12.98	57.96	4	54	0.00	2.07	0.21
mp-979013	{'Sm': 2.0, 'Ge': 6.0}	8	7.22	169.39	6	59	0.00	1.95	0.21
mp-30877	{'Sr': 2.0, 'Tl': 4.0}	6	8.30	198.67	6	13	0.00	2.19	0.20
mp-7595	{'Ge': 4.0, 'F': 8.0}	12	3.42	214.79	7	10	4.03	2.19	0.20
mp-1017550	{'Be': 3.0, 'N': 2.0}	5	2.85	32.09	4	174	4.28	1.74	0.20
mp-7457	{'Sn': 4.0, 'F': 8.0}	12	4.48	232.29	8	14	3.27	2.30	0.20
mp-632413	{'Co': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	3.49	61.82	4	10	0.07	2.35	0.20
mp-1009483	{'Ni': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.39	16.34	4	241	0.00	1.97	0.20
mp-554134	{'Sn': 2.0, 'S': 2.0}	4	1.28	390.41	2	3	1.63	2.13	0.20
mp-255	{'Na': 4.0, 'Hg': 4.0}	8	6.94	214.03	6	17	0.00	2.06	0.20
mp-570219	{'In': 2.0, 'Br': 6.0}	8	4.18	281.94	5	11	2.76	2.12	0.20
mp-974950	{'Rb': 3.0, 'Li': 1.0}	4	1.60	273.14	2	25	0.00	1.95	0.20
mp-27975	{'Nd': 2.0, 'Br': 6.0}	8	4.63	275.28	5	9	2.92	2.07	0.20
mp-23179	{'Ni': 4.0, 'Bi': 12.0}	16	10.64	427.85	10	34	0.00	2.16	0.20
mp-978969	{'Tl': 1.0, 'Au': 3.0}	4	16.30	81.01	7	453	0.00	2.27	0.20
mp-19921	{'Pb': 2.0, 'O': 2.0}	4	8.47	87.51	5	11	1.77	2.09	0.20
mp-9827	{'Rb': 2.0, 'Hg': 4.0}	6	7.08	228.19	5	11	0.00	2.09	0.20
mp-974883	{'Rb': 3.0, 'Na': 1.0}	4	1.58	293.48	2	6	0.00	1.97	0.20
mp-23309	{'Sc': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	2.14	235.20	4	7	3.88	2.07	0.20
mp-30670	{'Th': 6.0, 'Ga': 4.0}	10	10.24	271.12	7	64	0.00	1.99	0.19

mp-971950	{'Zn': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	6.97	74.99	5	52	0.00	2.18	0.19
mp-1602	{'Si': 2.0, 'S': 4.0}	6	1.62	189.62	3	6	3.14	2.02	0.19
mp-865077	{'Na': 1.0, 'Cd': 3.0}	4	6.32	94.61	4	28	0.00	1.97	0.19
mp-23219	{'Cu': 1.0, 'Br': 2.0}	3	4.46	83.20	4	7	0.00	2.39	0.19
mp-29950	{'Nb': 6.0, 'Cl': 16.0}	22	3.36	555.67	8	14	0.15	2.21	0.19
mp-23260	{'Ba': 4.0, 'I': 8.0}	12	4.90	530.27	6	15	3.44	2.21	0.18
mp-981382	{'Mg': 1.0, 'Hg': 5.0}	6	11.22	152.05	6	25	0.00	2.08	0.18
mp-22917	{'Cu': 2.0, 'Br': 2.0}	4	5.16	92.41	5	7	1.00	2.41	0.18
mp-32669	{'Ag': 4.0, 'S': 2.0}	6	6.42	128.13	7	19	1.35	2.54	0.18
mp-12651	{'Mg': 4.0, 'Pt': 4.0}	8	11.03	132.07	7	115	0.00	2.02	0.18
mp-30571	{'Tl': 4.0, 'Au': 2.0}	6	12.52	160.65	7	21	0.00	2.30	0.18
mp-642822	{'Ca': 2.0, 'C': 4.0}	6	2.15	99.20	3	52	2.55	1.78	0.18
mp-1644	{'Pr': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	7.34	59.46	3	59	0.00	2.09	0.18
mp-29145	{'H': 12.0, 'N': 4.0}	16	0.84	133.93	4	8	4.34	1.76	0.18
mp-22889	{'Zn': 4.0, 'Cl': 8.0}	12	2.68	338.43	5	7	0.04	2.11	0.18
mp-1008965	{'Cd': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.31	28.73	3	94	0.00	1.86	0.17
mp-570418	{'Yb': 1.0, 'I': 2.0}	3	5.26	134.73	3	4	4.01	2.09	0.17
mp-605	{'Zr': 2.0, 'Te': 10.0}	12	5.44	444.78	6	11	0.08	2.14	0.17
mp-22633	{'Pb': 12.0, 'O': 16.0}	28	8.22	553.73	11	40	1.15	2.09	0.17
mp-867205	{'Li': 1.0, 'Ga': 3.0}	4	5.32	67.50	4	11	0.00	2.04	0.17
mp-6907	{'Sr': 1.0, 'Si': 1.0}	2	3.49	55.02	2	44	0.00	1.86	0.17
mp-27734	{'Cr': 2.0, 'Br': 6.0}	8	3.94	245.72	5	8	1.29	2.24	0.17
mp-27974	{'Pu': 2.0, 'Br': 6.0}	8	5.92	271.29	5	11	0.00	2.09	0.17
mp-23177	{'Hg': 2.0, 'Br': 2.0}	4	6.68	139.48	5	12	2.46	2.50	0.17
mp-978917	{'Sn': 3.0, 'B': 1.0}	4	6.59	92.43	4	58	0.00	2.07	0.17
mp-570286	{'Bi': 2.0, 'Se': 2.0}	4	4.20	227.81	3	3	0.00	2.10	0.17
mp-982780	{'K': 3.0, 'Cd': 1.0}	4	1.81	210.95	2	2	0.00	1.89	0.17
mp-973835	{'Pd': 1.0, 'N': 1.0}	2	7.48	26.73	4	191	0.00	2.30	0.17
mp-1025373	{'Tc': 1.0, 'F': 6.0}	7	2.74	128.67	4	38	0.00	2.12	0.16
mp-23247	{'Zr': 2.0, 'Br': 6.0}	8	3.60	305.71	4	5	0.00	2.09	0.16
mp-695850	{'Cd': 1.0, 'Cl': 2.0}	3	3.64	83.60	3	9	3.52	2.26	0.15
mp-1018810	{'Na': 4.0, 'Cl': 2.0}	6	1.70	159.24	3	12	0.00	2.17	0.15
mvc-10954	{'Co': 2.0, 'O': 4.0}	6	3.60	83.98	4	18	0.00	2.03	0.15
mp-866291	{'Ag': 1.0, 'Br': 1.0}	2	4.92	63.40	3	28	1.17	2.46	0.15
mp-973974	{'K': 3.0, 'Mo': 1.0}	4	1.81	195.40	2	15	0.00	2.03	0.15
mp-569103	{'Mg': 18.0, 'Hg': 6.0}	24	5.07	537.24	7	40	0.00	1.96	0.15
mp-27934	{'Cd': 2.0, 'Br': 4.0}	6	4.41	204.88	4	10	2.94	2.24	0.15
mp-13148	{'Ca': 6.0, 'N': 4.0}	10	2.83	174.26	4	51	1.37	1.94	0.15
mp-981209	{'Ti': 3.0, 'Ni': 1.0}	4	5.51	60.94	4	78	0.00	2.17	0.15
mp-608366	{'Cu': 4.0, 'N': 24.0}	28	2.52	389.69	7	13	0.00	2.08	0.14
mp-27785	{'Ti': 1.0, 'Br': 2.0}	3	4.60	74.93	3	4	0.00	2.20	0.14
mp-971928	{'Zn': 3.0, 'Ge': 1.0}	4	6.87	65.02	4	58	0.00	2.15	0.14
mp-13174	{'Pt': 1.0, 'N': 1.0}	2	12.70	27.33	4	192	0.00	2.25	0.14
mp-20066	{'C': 4.0, 'O': 8.0}	12	1.50	195.38	3	5	6.64	1.73	0.13
mp-974990	{'Rb': 3.0, 'Hg': 1.0}	4	2.99	254.06	2	39	0.00	2.01	0.13
mp-2247	{'Ag': 2.0, 'N': 6.0}	8	4.32	115.16	5	16	1.75	2.22	0.13
mp-975511	{'In': 1.0, 'Sb': 3.0}	4	7.18	111.03	4	50	0.00	2.35	0.13
mp-29665	{'Sb': 3.0, 'Au': 1.0}	4	8.78	106.33	4	28	0.00	2.23	0.13
mp-567484	{'Pt': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	5.13	172.30	4	8	1.35	2.23	0.13
mp-27979	{'La': 2.0, 'I': 6.0}	8	4.89	353.03	4	6	2.07	2.20	0.13
mp-23297	{'Br': 2.0, 'F': 6.0}	8	3.22	141.38	4	7	2.34	2.14	0.13

mp-22897	{'Hg': 2.0, 'Cl': 2.0}	4	6.26	125.30	4	9	2.82	2.50	0.12
mp-642855	{'Mg': 6.0, 'Ge': 2.0}	8	2.72	178.03	3	23	0.00	1.93	0.12
mp-27954	{'Cu': 4.0, 'N': 12.0}	16	2.78	251.80	5	10	1.54	2.08	0.12
mp-16364	{'Sn': 1.0, 'Te': 1.0}	2	4.34	94.18	2	26	0.18	2.29	0.12
mp-11725	{'C': 2.0, 'O': 4.0}	6	1.43	101.92	2	5	6.44	1.75	0.12
mvc-13239	{'Ti': 2.0, 'F': 8.0}	10	2.87	143.48	4	8	4.35	2.06	0.12
mp-7988	{'Cs': 2.0, 'O': 1.0}	3	4.05	115.60	2	5	0.62	2.00	0.11
mp-862865	{'Pa': 2.0, 'Zn': 6.0}	8	9.38	151.22	5	78	0.00	2.09	0.11
mp-22871	{'Zr': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	2.56	256.10	3	6	0.54	2.12	0.11
mp-561664	{'Te': 4.0, 'F': 16.0}	20	3.96	341.15	6	11	4.02	2.12	0.11
mp-571143	{'Ti': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	2.28	224.90	3	5	0.03	2.14	0.11
mp-23244	{'U': 2.0, 'I': 6.0}	8	6.28	326.99	4	6	0.00	2.18	0.11
mp-862983	{'In': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	2.65	276.67	3	6	3.03	2.14	0.11
mp-504825	{'Se': 8.0, 'Cl': 8.0}	16	2.57	592.37	4	2	2.22	2.10	0.11
mp-22859	{'Hg': 2.0, 'I': 2.0}	4	6.84	159.07	4	10	1.89	2.63	0.11
mp-1009766	{'Ag': 1.0, 'N': 1.0}	2	6.68	30.32	3	143	0.00	2.40	0.11
mp-23267	{'Be': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	1.66	160.05	2	4	6.34	1.92	0.11
mp-23275	{'Ti': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	2.51	204.05	3	9	0.00	2.14	0.11
mp-567354	{'Ti': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	2.47	207.22	3	5	0.00	2.14	0.10
mp-985587	{'Al': 6.0, 'O': 9.0}	15	1.62	313.19	3	37	4.81	1.91	0.10
mp-473	{'Na': 12.0, 'P': 44.0}	56	2.05	1329.85	6	13	1.97	2.02	0.10
mp-1025168	{'Ru': 1.0, 'F': 6.0}	7	2.83	126.15	3	19	0.00	2.16	0.10
mp-569152	{'Sn': 4.0, 'Cl': 8.0}	12	3.58	352.26	4	6	3.11	2.24	0.10
mp-865473	{'V': 2.0, 'Br': 6.0}	8	3.35	287.96	3	6	0.00	2.19	0.10
mp-23279	{'K': 2.0, 'Bi': 4.0}	6	6.85	221.47	3	30	0.00	2.09	0.09
mp-22883	{'Pb': 1.0, 'I': 2.0}	3	5.11	149.73	2	4	2.43	2.19	0.09
mp-1818	{'Si': 1.0, 'F': 4.0}	5	1.98	87.48	2	5	7.94	1.99	0.09
mp-568233	{'Cd': 2.0, 'I': 4.0}	6	5.06	240.29	3	6	2.39	2.28	0.09
mp-999446	{'Nb': 3.0, 'Cr': 1.0}	4	7.76	70.77	3	132	0.00	2.13	0.09
mp-632296	{'H': 2.0, 'F': 2.0}	4	1.72	38.59	2	8	6.72	2.08	0.09
mp-23282	{'Zr': 2.0, 'I': 6.0}	8	4.27	366.77	3	3	0.06	2.26	0.08
mp-570136	{'Cu': 6.0, 'I': 6.0}	12	5.64	336.55	5	10	1.46	2.48	0.08
mp-569017	{'Pd': 2.0, 'I': 4.0}	6	4.80	249.05	3	6	0.97	2.39	0.08
mp-864616	{'I': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	2.38	275.67	2	4	0.00	2.18	0.08
mp-33107	{'S': 1.0, 'F': 4.0}	5	2.05	87.50	2	4	1.53	2.05	0.08
mvc-3453	{'Sb': 4.0, 'F': 20.0}	24	3.49	412.08	5	9	3.68	2.11	0.08
mp-22863	{'Cu': 2.0, 'I': 2.0}	4	5.70	110.92	3	8	1.57	2.48	0.08
mp-972082	{'Tl': 3.0, 'Si': 1.0}	4	9.68	109.95	3	82	0.00	2.26	0.08
mvc-14413	{'Te': 2.0, 'O': 6.0}	8	4.03	144.85	3	33	0.43	2.10	0.08
mp-865493	{'V': 2.0, 'I': 6.0}	8	3.96	362.30	3	6	0.00	2.39	0.08
mp-1011376	{'Ce': 1.0, 'Se': 2.0}	3	6.92	71.50	2	54	0.00	1.98	0.08
mp-22908	{'Bi': 4.0, 'Cl': 12.0}	16	4.18	501.04	4	4	3.43	2.19	0.08
mp-909	{'As': 8.0, 'Se': 12.0}	20	4.28	599.59	4	8	1.54	2.05	0.08
mp-30139	{'Be': 2.0, 'Br': 4.0}	6	2.76	203.46	2	1	5.35	2.02	0.08
mp-973199	{'Sb': 6.0, 'Pb': 2.0}	8	8.20	231.97	4	52	0.00	2.37	0.08
mp-8511	{'P': 2.0, 'F': 10.0}	12	2.29	182.96	3	6	7.11	2.07	0.08
mp-23192	{'Hg': 2.0, 'I': 4.0}	6	5.32	283.44	3	4	1.85	2.48	0.07
mp-27455	{'Y': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	2.30	282.01	2	6	4.98	2.07	0.07
mp-28460	{'Br': 8.0, 'O': 4.0}	12	3.64	320.68	3	6	1.45	2.08	0.07
mp-571386	{'Cu': 1.0, 'Cl': 1.0}	2	4.92	33.39	2	47	0.34	2.40	0.07
mp-976254	{'Li': 3.0, 'Mg': 1.0}	4	0.93	80.39	1	19	0.00	1.81	0.07

mp-570437	{'Cd': 3.0, 'I': 6.0}	9	5.06	360.76	3	6	2.40	2.28	0.07
mp-28319	{'Pt': 4.0, 'I': 8.0}	12	6.67	447.20	4	4	1.25	2.35	0.07
mp-684692	{'I': 4.0, 'N': 12.0}	16	4.45	252.31	4	7	0.00	2.10	0.07
mp-540783	{'Os': 2.0, 'O': 8.0}	10	4.51	187.25	3	4	3.30	2.02	0.07
mp-556034	{'C': 4.0, 'O': 8.0}	12	1.52	192.42	2	4	6.69	1.81	0.07
mp-13496	{'Zr': 1.0, 'Pd': 1.0}	2	8.65	37.93	2	143	0.00	2.23	0.07
mp-32829	{'Cu': 1.0, 'Cl': 4.0}	5	2.75	123.90	2	2	0.00	2.24	0.06
mp-754815	{'Y': 2.0, 'Br': 6.0}	8	3.48	313.47	2	5	4.05	2.03	0.06
mp-11466	{'Na': 1.0, 'Hg': 2.0}	3	8.97	78.51	2	15	0.00	2.11	0.06
mp-2649	{'Zr': 10.0, 'Sb': 6.0}	16	7.48	364.50	4	105	0.00	2.08	0.06
mp-864982	{'Dy': 2.0, 'Br': 6.0}	8	3.59	371.85	2	4	3.01	2.10	0.06
mp-571035	{'Os': 1.0, 'Cl': 4.0}	5	4.00	137.84	2	7	0.00	2.20	0.06
mp-862986	{'Pm': 2.0, 'Br': 6.0}	8	3.43	372.38	2	3	2.89	2.12	0.06
mp-864617	{'Nd': 2.0, 'I': 6.0}	8	3.80	458.32	2	3	2.02	2.16	0.06
mp-639662	{'Cr': 4.0, 'F': 20.0}	24	2.84	343.51	4	8	1.46	2.16	0.06
mp-27182	{'Gd': 2.0, 'Br': 6.0}	8	3.95	334.01	2	6	2.21	2.06	0.06
mp-8560	{'S': 1.0, 'F': 6.0}	7	2.26	107.44	2	6	5.91	2.11	0.06
mp-567503	{'Pb': 2.0, 'I': 4.0}	6	5.13	298.18	2	4	2.45	2.19	0.06
mp-23312	{'Mo': 4.0, 'Br': 12.0}	16	3.94	565.37	3	2	0.00	2.15	0.06
mp-540789	{'Pb': 2.0, 'I': 4.0}	6	5.46	280.37	2	4	2.41	2.18	0.05
mp-32780	{'Au': 4.0, 'Cl': 4.0}	8	6.76	228.51	3	6	2.08	2.37	0.05
mp-974743	{'Rb': 3.0, 'V': 1.0}	4	2.22	229.93	1	51	0.00	2.01	0.05
mp-29502	{'Al': 16.0, 'Te': 24.0}	40	3.96	1465.79	4	6	1.84	2.08	0.05
mp-973316	{'Na': 2.0, 'Li': 6.0}	8	0.75	193.40	1	16	0.00	1.81	0.05
mp-864915	{'Hf': 2.0, 'Br': 6.0}	8	4.36	318.62	2	11	0.00	2.13	0.05
mp-558928	{'Kr': 2.0, 'F': 4.0}	6	2.99	135.15	2	42	2.85	2.34	0.05
mp-974627	{'K': 3.0, 'Tl': 1.0}	4	2.59	206.05	1	14	0.00	1.92	0.05
mp-866003	{'Er': 2.0, 'I': 6.0}	8	4.36	417.77	2	3	2.05	2.23	0.05
mp-23253	{'Rb': 2.0, 'Bi': 4.0}	6	7.30	228.96	2	29	0.00	2.10	0.05
mp-23281	{'Sb': 2.0, 'I': 6.0}	8	4.29	388.69	2	3	2.21	2.22	0.05
mp-978992	{'Sn': 2.0, 'H': 8.0}	10	3.49	116.75	2	2	0.00	1.69	0.05
mp-974982	{'Rb': 3.0, 'In': 1.0}	4	2.63	234.74	1	8	0.00	2.02	0.05
mp-973614	{'K': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	2.24	175.17	1	9	0.00	2.01	0.05
mp-865521	{'Lu': 2.0, 'I': 6.0}	8	4.35	424.47	2	3	2.18	2.28	0.05
mp-1025571	{'W': 3.0, 'S': 6.0}	9	4.48	276.00	2	19	1.63	2.06	0.05
mp-27747	{'Pd': 4.0, 'I': 8.0}	12	5.46	438.49	3	4	0.96	2.39	0.05
mp-23292	{'Hg': 2.0, 'Br': 4.0}	6	5.20	230.20	2	4	2.84	2.32	0.05
mp-22849	{'Bi': 2.0, 'I': 6.0}	8	4.79	409.10	2	3	2.56	2.25	0.05
mp-983388	{'K': 3.0, 'Hg': 1.0}	4	2.59	204.18	1	3	0.00	2.01	0.05
mp-720	{'Tl': 4.0, 'F': 4.0}	8	7.63	194.58	3	4	3.26	2.39	0.05
mp-580226	{'Cu': 2.0, 'Se': 2.0}	4	6.13	77.20	2	23	0.00	2.33	0.05
mp-570722	{'Nb': 2.0, 'I': 6.0}	8	4.34	362.56	2	4	0.00	2.32	0.04
mp-23223	{'Ti': 2.0, 'I': 6.0}	8	4.27	333.45	2	3	0.00	2.30	0.04
mp-864733	{'Mo': 2.0, 'I': 6.0}	8	4.12	384.02	2	3	0.00	2.37	0.04
mp-23173	{'Hg': 2.0, 'I': 4.0}	6	5.17	291.90	2	3	2.58	2.46	0.04
mp-568002	{'Hf': 2.0, 'I': 6.0}	8	5.40	343.88	2	4	0.00	2.25	0.04
mp-1009213	{'Mn': 1.0, 'Sb': 1.0}	2	4.96	59.19	1	37	0.00	2.09	0.04
mp-7540	{'Cu': 6.0, 'P': 2.0}	8	7.23	101.82	3	125	0.00	2.36	0.04
mp-643265	{'Re': 2.0, 'F': 14.0}	16	4.66	227.63	3	6	2.00	2.13	0.04
mp-22856	{'Bi': 8.0, 'S': 12.0}	20	6.48	527.17	3	22	1.50	2.08	0.04
mp-568388	{'Bi': 4.0, 'I': 4.0}	8	6.10	365.52	2	4	0.83	2.27	0.04

mp-644607	{'C': 2.0, 'O': 4.0}	6	1.56	93.75	1	4	6.32	1.76	0.04
mp-972965	{'Gd': 1.0, 'F': 3.0}	4	7.83	45.45	2	138	2.89	2.20	0.04
mp-368	{'P': 8.0, 'O': 12.0}	20	1.89	385.50	2	3	3.85	1.97	0.04
mp-976113	{'La': 1.0, 'Au': 3.0}	4	13.25	91.49	2	100	0.00	2.18	0.04
mp-27519	{'Se': 8.0, 'O': 24.0}	32	2.98	565.82	3	5	2.46	2.03	0.04
mp-27666	{'Ir': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	4.89	202.80	2	12	1.94	2.26	0.04
mp-557259	{'Mo': 4.0, 'F': 24.0}	28	2.95	473.21	3	5	4.17	2.14	0.04
mp-1659	{'Th': 4.0, 'Re': 8.0}	12	16.78	239.25	3	186	0.00	1.97	0.04
mp-30351	{'Mg': 1.0, 'Ag': 3.0}	4	7.96	72.53	2	74	0.00	2.45	0.03
mp-972895	{'Sc': 2.0, 'Au': 6.0}	8	14.18	148.97	3	94	0.00	2.33	0.03
mp-27639	{'I': 2.0, 'Br': 2.0}	4	3.41	201.13	1	2	1.44	2.18	0.03
mp-2275	{'U': 4.0, 'F': 24.0}	28	4.64	504.13	3	5	2.80	2.04	0.03
mp-752602	{'Bi': 4.0, 'Br': 12.0}	16	4.42	674.19	2	4	2.91	2.15	0.03
mp-27725	{'Au': 4.0, 'I': 4.0}	8	6.76	318.33	2	2	2.09	2.37	0.03
mp-972874	{'Se': 1.0, 'Br': 3.0}	4	3.88	136.54	1	12	0.00	2.09	0.03
mp-10729	{'Pd': 4.0, 'O': 2.0}	6	8.11	93.72	2	155	0.00	2.30	0.03
mp-22626	{'Os': 4.0, 'F': 24.0}	28	4.50	449.36	3	6	0.00	2.16	0.03
mp-22876	{'Cs': 4.0, 'I': 12.0}	16	3.99	856.01	2	5	2.02	2.41	0.03
mp-867355	{'Te': 2.0, 'Br': 4.0}	6	3.26	292.37	1	4	0.71	2.12	0.03
mp-23264	{'Ti': 4.0, 'I': 12.0}	16	4.36	652.97	2	4	0.20	2.29	0.03
mp-560553	{'Ir': 4.0, 'F': 24.0}	28	4.59	443.34	3	4	0.78	2.17	0.03
mp-985443	{'Ag': 3.0, 'Hg': 1.0}	4	11.38	76.51	2	75	0.00	2.53	0.03
mp-976423	{'Nd': 3.0, 'Pd': 1.0}	4	7.87	113.75	1	42	0.00	1.82	0.03
mp-568848	{'Ga': 8.0, 'Cl': 16.0}	24	2.65	706.19	2	2	4.03	2.16	0.03
mp-28077	{'Pb': 4.0, 'Br': 8.0}	12	6.13	397.74	2	2	3.05	2.25	0.03
mp-558149	{'B': 8.0, 'F': 24.0}	32	1.81	496.32	2	5	8.16	1.99	0.03
mp-1039508	{'Ce': 4.0, 'Mg': 2.0}	6	4.67	216.50	1	27	0.00	1.95	0.03
mp-571011	{'Cs': 4.0, 'I': 16.0}	20	4.04	1051.92	2	5	1.78	2.38	0.02
mvc-7058	{'Bi': 2.0, 'S': 4.0}	6	4.02	225.41	1	7	0.00	2.07	0.02
mp-570886	{'Be': 2.0, 'I': 4.0}	6	3.59	243.26	1	2	4.08	2.13	0.02
mp-30952	{'Ga': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	2.08	280.53	1	1	4.28	2.13	0.02
mp-1018851	{'Os': 2.0, 'N': 4.0}	6	12.23	59.27	2	247	0.00	2.23	0.02
mp-676241	{'Fe': 2.0, 'Cl': 6.0}	8	2.20	244.81	1	2	0.67	2.20	0.02
mp-569610	{'Co': 1.0, 'I': 2.0}	3	5.80	89.57	1	5	0.00	2.41	0.02
mp-861867	{'Ac': 2.0, 'I': 6.0}	8	3.95	511.17	1	2	2.59	2.22	0.02
mp-2414	{'S': 12.0, 'O': 36.0}	48	1.97	808.70	2	5	5.14	1.97	0.02
mp-569008	{'Pd': 2.0, 'Cl': 4.0}	6	3.37	174.66	1	22	1.37	2.27	0.02
mp-862800	{'Pr': 2.0, 'I': 6.0}	8	3.86	448.64	1	3	1.96	2.21	0.02
mp-23189	{'B': 2.0, 'I': 6.0}	8	3.10	419.25	1	1	0.00	2.32	0.02
mp-567809	{'Ag': 2.0, 'I': 2.0}	4	5.55	140.54	1	5	2.21	2.50	0.02
mp-569157	{'Bi': 2.0, 'I': 6.0}	8	4.66	420.36	1	3	2.55	2.25	0.02
mp-971757	{'Zn': 1.0, 'Hg': 3.0}	4	10.86	102.01	1	30	0.00	2.09	0.02
mp-23280	{'As': 4.0, 'Cl': 12.0}	16	2.07	582.09	1	1	4.10	2.08	0.02
mp-1008490	{'Bi': 1.0, 'I': 3.0}	4	7.28	134.45	1	36	0.00	2.43	0.02
mp-27257	{'P': 4.0, 'Br': 12.0}	16	2.52	714.44	1	1	3.35	2.09	0.02
mp-23288	{'Al': 4.0, 'Br': 12.0}	16	2.65	668.26	1	1	4.10	2.06	0.02
mp-505319	{'Pt': 4.0, 'F': 24.0}	28	4.83	425.45	2	8	0.00	2.15	0.02
mp-23317	{'As': 4.0, 'Br': 12.0}	16	3.02	691.07	1	1	3.20	2.06	0.01
mp-568245	{'Nb': 2.0, 'Br': 10.0}	12	3.72	440.21	1	3	1.60	2.14	0.01
mp-30953	{'Ga': 4.0, 'Br': 12.0}	16	3.09	665.06	1	2	3.36	2.07	0.01
mp-22872	{'Sb': 4.0, 'Cl': 12.0}	16	2.63	576.39	1	2	3.75	2.11	0.01

mp-11540	{'Pt': 1.0, 'O': 1.0}	2	14.17	24.74	1	160	0.00	2.35	0.01
mp-29866	{'Sn': 4.0, 'Cl': 16.0}	20	2.08	830.75	1	1	3.69	2.11	0.01
mp-973100	{'Sc': 1.0, 'Cu': 3.0}	4	6.88	56.87	1	105	0.00	2.33	0.01
mp-541013	{'Ti': 2.0, 'I': 8.0}	10	4.37	422.46	1	2	1.11	2.29	0.01
mp-30930	{'Al': 4.0, 'I': 12.0}	16	3.20	845.06	1	1	3.27	2.23	0.01
mp-838	{'Cu': 3.0, 'Sn': 1.0}	4	8.76	58.61	1	107	0.00	2.33	0.01
mp-30954	{'Ga': 4.0, 'I': 12.0}	16	3.65	820.76	1	1	2.39	2.24	0.01
mp-567789	{'In': 4.0, 'I': 12.0}	16	3.90	844.91	1	1	2.34	2.24	0.01
mp-27465	{'S': 32.0, 'O': 4.0}	36	1.71	1058.05	1	2	2.42	1.99	0.01
mp-570140	{'Au': 4.0, 'Br': 4.0}	8	7.09	259.40	1	4	2.15	2.43	0.01
mp-540572	{'N': 12.0, 'Cl': 36.0}	48	1.64	1463.40	1	2	2.16	2.07	0.01
mp-30721	{'Hg': 10.0, 'Pd': 4.0}	14	13.59	297.20	1	68	0.00	2.31	0.00